

**Ioneninduzierte Röntgenanregung  
in Wolfram-Einkristallen**

Hartmut Tittel

**1978**





Digitized by the Internet Archive  
in 2026



Ioneninduzierte Röntgenanregung  
in Wolfram-Einkristallen

Inaugural - Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
des Fachbereichs Physik  
der Ludwig-Maximilians-Universität München



vorgelegt von  
Hartmut Tittel

München  
1977



1. Berichterstatter: Prof. Dr. F. Bell
2. Berichterstatter: Prof. Dr. J. Peisl

Tag der mündlichen Prüfung: 21. Februar 1978

DISSERTATIONS- UND FOTODRUCK FRANK oHG  
8 München 2, Gabelsbergerstraße 15, Tel. 2 8 0 9 0 9 0

# Inhaltsverzeichnis

|                                                                                                                                                       | Seite |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| 1. Einleitung .....                                                                                                                                   | 1     |
| 2. Schwerionenbeschleuniger .....                                                                                                                     | 2     |
| 2.1 Ionenoptik .....                                                                                                                                  | 2     |
| 2.2 Ionenquelle .....                                                                                                                                 | 4     |
| 2.3 Strahlführungssystem .....                                                                                                                        | 6     |
| 2.3.1 Elektrostatische Optik .....                                                                                                                    | 6     |
| 2.3.2 Magnetische Quadrupole .....                                                                                                                    | 7     |
| 2.3.3 Justiermagnete .....                                                                                                                            | 7     |
| 2.3.4 Ablenkmagnet .....                                                                                                                              | 8     |
| 2.3.5 Mechanische Vorrichtungen .....                                                                                                                 | 12    |
| 2.4 Meßstand .....                                                                                                                                    | 12    |
| 2.4.1 Targetkammer .....                                                                                                                              | 12    |
| 2.4.2 Manipulator .....                                                                                                                               | 13    |
| 2.5 Vakuumsystem .....                                                                                                                                | 14    |
| 3. Meßanordnung .....                                                                                                                                 | 15    |
| 3.1 Messung charakteristischer Röntgenstrahlung .....                                                                                                 | 15    |
| 3.2 Messung der rückgestreuten Protonen .....                                                                                                         | 16    |
| 3.3 Strahlstrommessung .....                                                                                                                          | 17    |
| 4. Experimente zur Röntgenanregung durch schwere Ionen an<br>Wolfram-Einkristallen .....                                                              | 17    |
| 4.1 Vorbereitung .....                                                                                                                                | 17    |
| 4.1.1 Kristallpräparation .....                                                                                                                       | 17    |
| 4.1.2 Kristalljustierung .....                                                                                                                        | 19    |
| 4.2 Winkelabhängigkeit der Ausbeute an rückgestreuten<br>Protonen und der Wolfram-(N)-Strahlung parallel<br>der $\langle 111 \rangle$ -Richtung ..... | 19    |
| 4.3 Messung der Wolfram-(M)-Linie und der Kupfer-(L)-<br>Linie an einem mit Kupfer dotiertem Wolfram-<br>Kristall .....                               | 20    |
| 4.4 Änderung der protoneninduzierten W-(M)-Ausbeute<br>beim Übergang von axialer zu planarer Gitter-<br>führung .....                                 | 21    |
| 4.5 Auswertung der Meßergebnisse .....                                                                                                                | 21    |

|                                                                                                               |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 5. Diskussion .....                                                                                           | 22 |
| 5.1 Stoßparameterabhängigkeit der Ionisierungswahrscheinlichkeit für die Anregung der Wolfram-(N)-Linie ..... | 22 |
| 5.1.1 Ionisationsprozeß .....                                                                                 | 22 |
| 5.1.2 Theorie .....                                                                                           | 23 |
| 5.1.3 Numerische Rechnungen für die $N_{4/5}$ -Schale von Wolfram .....                                       | 26 |
| 5.1.4 Gitterführung ("Channeling") .....                                                                      | 28 |
| 5.1.5 Monte-Carlo-Simulation .....                                                                            | 29 |
| 5.1.6 Vergleich mit den Meßergebnissen .....                                                                  | 38 |
| 5.2 Lokalisation von Kupferatomen in Wolfram-Einkristallen .....                                              | 42 |
| 5.2.1 Allgemeines zur Lokalisation .....                                                                      | 42 |
| 5.2.2 Pauli-Anregung .....                                                                                    | 43 |
| 5.2.3 Ergebnisse .....                                                                                        | 45 |
| 5.3 Übergang von axialer zu planarer Gitterführung ....                                                       | 48 |
| 5.3.1 Modellvorstellung .....                                                                                 | 48 |
| 5.3.2 Vergleich mit Experiment .....                                                                          | 49 |
| 6. Zusammenfassung .....                                                                                      | 51 |
| 7. Literaturverzeichnis .....                                                                                 | 52 |
| 8. Anhang .....                                                                                               | 57 |
| 8.1 Matrizen der ionenoptischen Elemente .....                                                                | 57 |
| 8.2 Berechnung von Matrixelementen für Coulomb-Ionisation in zeitabhängiger Störungsrechnung                  |    |
| 1. Ordnung .....                                                                                              | 59 |

## 1. Einleitung<sup>v</sup>

Werden schwere, schnelle Ionen in eine niedrigindizierte kristallographische Richtung eines einkristallinen Festkörpertargets eingeschossen, so erfolgt an den Atomen eine korrelierte Kleinkwinkelstreuung, deren wesentliches Merkmal darin besteht, daß die Flußverteilung der eingeschossenen Ionen in charakteristischer Weise von derjenigen bei Einschuß in ein amorphes Target abweicht: der Fluß an den Gitterpositionen wird stark reduziert, im Zwischengitterbereich hingegen wesentlich erhöht. Dieser Effekt kann zur Lokalisierung von Fremdatomen in einkristallinen Targets verwendet werden. Etwas vereinfacht dargestellt, sollte jede elastische oder inelastische Wechselwirkung mit Fremdatomen bei Einschuß in eine ausgezeichnete Richtung eine besonders hohe Ausbeute zeigen, wenn das Fremdatom auf einem Zwischengitterplatz sitzt und umgekehrt eine niedrige Ausbeute bei substitutionellem Einbau.

Die vorliegende Arbeit ist ein Beitrag zu der Frage, inwieweit mit Hilfe der Anregung charakteristischer Röntgenstrahlung durch schnelle Ionen solche Lokalisierungsexperimente möglich sind. Im Zusammenhang damit wird auch auf die atomphysikalisch interessante Frage eingegangen, ob die differentiellen Wirkungsquerschnitte für die Ionisation innerer Schalen, insbesondere bei hohen Projektilenergien, in zeitabhängiger Störungsrechnung 1. Ordnung richtig wiedergegeben werden. Die Kenntnis dieser Wirkungsquerschnitte ist für die quantitative Auswertung von Lokalisationsexperimenten von Bedeutung.

Der experimentelle Teil der Arbeit beschreibt im wesentlichen die Konzeption und den Aufbau eines kleinen Schwerionenbeschleunigers. Röntgenanregung im Zusammenhang mit korrelierter Streuung ("channeling") wird an Experimenten zur Anregung von Wolfram-(N)-Strahlung durch Protonen dargestellt und diskutiert. Ein Lokalisierungsexperiment wurde mit Hilfe der Anregung von Kupfer-(L)-Strahlung an in Wolfram implantiertem Kupfer durchgeführt.

## 2. Schwerionenbeschleuniger

Es wurde ein Schwerionenbeschleuniger konzipiert, der Ionen nahezu aller Elemente im Energiebereich von 30 bis 180 keV (für einfach geladene Ionen) erzeugen kann. Besonderes Augenmerk wurde auf die Vermeidung einer Kontamination durch Kohlenwasserstoffe gelegt.

Abb. 1 gibt einen Überblick über die Anordnung der einzelnen Komponenten des Beschleunigers; auf diese wird in den nachfolgenden Abschnitten näher eingegangen. Die Ionenquelle mit ihrer gesamten Versorgung ist, über einen Trenntransformator gegenüber Erde isoliert, auf Hochspannungspotential. Alle Quellenparameter können von den Meßplätzen aus kontrolliert und gesteuert werden. Die Ionen werden nach der Extraktion aus der Quelle in einem elektrostatischen Doppellinsensystem beschleunigt und fokussiert. Der Strahl kann des weiteren durch magnetische Quadrupole beeinflußt werden. Diese erlauben in Verbindung mit zwei Justiermagneten ein Einfädeln des Strahles in Blendensysteme. Die Impulsselektion wird in einem mit speziellen Polschuhen ausgerüsteten Ablenkmagneten vorgenommen. Die Mittelebene dieses Magneten ist um  $15^\circ$  zur Strahlachse gedreht; dadurch kann auch ein Meßplatz mit  $60^\circ$  Ablenkwinkel betrieben werden. Es können noch weitere fünf Strahlrohre unter  $\pm 15^\circ$ ,  $\pm 30^\circ$  und  $+ 45^\circ$  an die Ablenkkammer angeflanscht werden.

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Experimente wurde zur Festlegung der Strahlemittanz ein Blendenrohr vor der eigentlichen UHV-Targetkammer eingefügt. Bei einem Strahldurchmesser von 1 mm konnten in der Kammer folgende Ströme erzielt werden: 40nA  $H^+$ , 10nA  $C^+$ , 50nA  $O^+$ , 100nA  $N^+$ , 1 $\mu$ A  $Ne^+$ , 3nA  $Al^+$ , 10 $\mu$ A  $Ar^+$ , 10nA  $Cu^+$ , 4 $\mu$ A  $Kr^+$  und 2 $\mu$ A  $Xe^+$ .

### 2.1 Ionenoptik /1-3/

In diesem Abschnitt werden die Überlegungen und Methoden, die zur Wahl und Dimensionierung der ionenoptischen Elemente des Schwerionenbeschleunigers führten, dargelegt. Einzelheiten finden sich in den anschließenden Kapiteln.

Ziel der Überlegungen war es, einen Ionenstrahl veränderlicher und möglichst großer Maximalintensität mit kleiner Divergenz auf das Target zu bringen. Ausgangspunkt war die vorgegebene Emittanz der

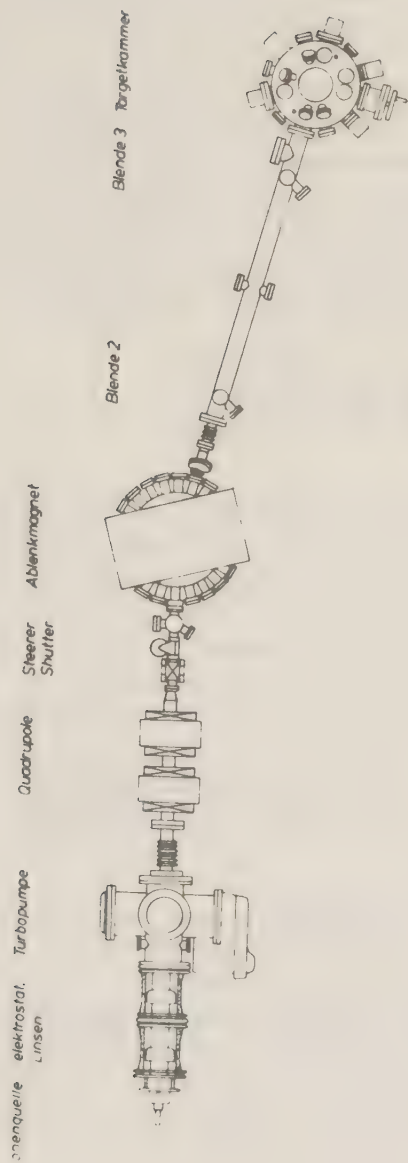


Abb. 1: Schwerionenbeschleuniger

Ionenquelle. Die Akzeptanz der folgenden ionenoptischen Elemente (einschließlich Strahlrohr und Blenden) mußte so bemessen werden, daß die oben genannte Forderung am Ort des Targets erfüllt werden konnte. Dieses Problem wurde mit Hilfe der Matrizenrechnung /1,5/ (bei der Lösung der Bewegungsgleichung der Ionen werden nur Glieder erster Ordnung berücksichtigt) angegangen und zwar in der Form des "waist-to-waist transport" /1/ (siehe weiter unten).

Der Strahl bewege sich in z-Richtung; die Horizontalebene wird von der x- und z-Richtung aufgespannt. Ort x, Divergenz  $x' \equiv dx/dz$  und Impulsaufstreuung  $\Delta p/p$  eines Teilchens an der Stelle  $z_2$  ergeben sich aus den gleichen Größen bei  $z_1$  nach

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \\ \Delta p/p \end{pmatrix}_2 = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ x' \\ \Delta p/p \end{pmatrix}_1 \quad (1)$$

Bei nichtdispersiven Systemen reduziert sich dieser Ausdruck auf Zweier-Vektoren  $\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix}$  und eine 2x2-Übertragungsmatrix. Letztere kann durch das Matrizenprodukt eines feldfreien Raumes (Länge  $z_2$ ), einer dicken Linse (Elemente  $l_{ik}$ ) und wieder eines feldfreien Raumes (Länge  $z_1$ ) dargestellt werden. In Abb. 2 sind die Kenngrößen einer dicken Linse definiert. Der Zusammenhang mit den Matrixelementen ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} f_\alpha &= -l_{21}^{-1} & F_\alpha &= -l_{11} l_{21}^{-1} & \Delta F_\alpha &= (1 - l_{11}) l_{21}^{-1} \\ f_e &= -D l_{21}^{-1} & F_e &= -l_{22} l_{21}^{-1} & \Delta F_e &= (D - l_{22}) l_{21}^{-1} \\ D &= l_{11} l_{22} - l_{12} l_{21} \end{aligned} \quad (2)$$

Bei einem Strahltransportsystem wird i.a. keine Punkt-zu-Punkt-Kongruenz bei der Abbildung angestrebt, sondern vielmehr die Erzeugung kleinster Strahlquerschnitte (waist, neck, cross-over). Im Phasenraum bedeutet dies einen Übergang von einer aufrechtstehenden Ellipse zu einer anderen aufrechtstehenden Ellipse (waist-to-waist transport). Sind  $\hat{x}_1$  und  $\hat{x}_2$  die Halbachsen dieser Ellipsen und  $\phi$  ein willkürlicher Phasenwinkel, so läßt sich die Übertragungsmatrix wie folgt schreiben:

$$(A_{ik}) = N^{-1/2} \begin{pmatrix} \varphi^{1/2} \cos \phi & X_1 \varphi^{1/2} \sin \phi \\ -(X_1 \varphi^{1/2})^{-1} \sin \phi & \varphi^{-1/2} \cos \phi \end{pmatrix} \quad (3)$$

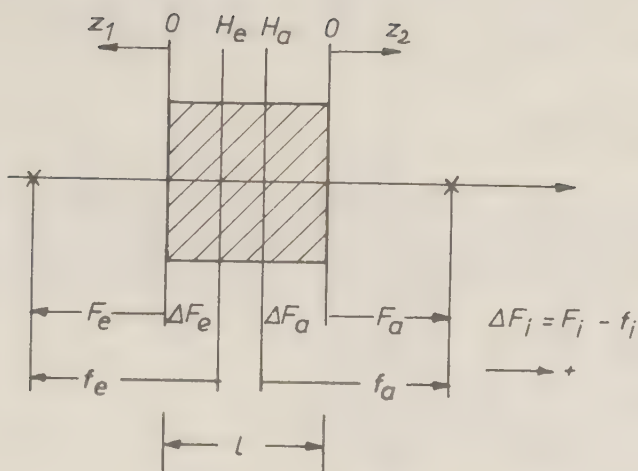


Abb. 2: Elemente einer dicken Linse

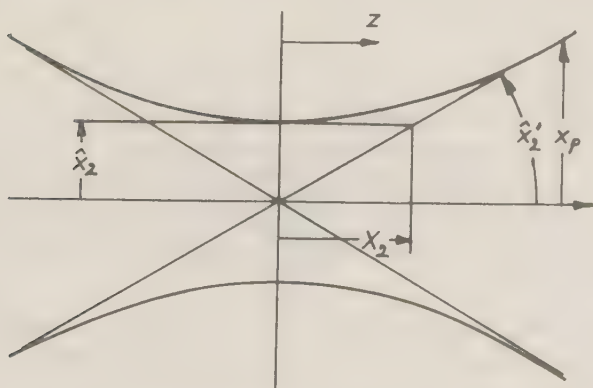


Abb. 3: Kenngrößen eines "cross-over"

wobei  $N$  das Verhältnis der Energie der aus dem System austretenden Teilchen zur Eintrittsenergie ist,  $\varphi = X_2/X_1$  und  $X_1 = \hat{x}_1/\hat{x}_1'$ . Die Strahlausdehnung  $x_p(z)$  erhält man aus der Beziehung (siehe Abb. 3)

$$x_p(z) = \hat{x}_2(1+z^2/X_2^2)^{1/2} \quad (4)$$

Kennt man die Lage  $z_1$  und die charakteristische Länge  $X_1$  einer Strahleinschnürung sowie die Emittanz  $\epsilon_1 = \hat{x}_1\hat{x}_1'$  [cm mrad], so ergeben sich die entsprechenden Größen für die Strahleinschnürung 2 aus:

$$\begin{aligned} \hat{x}_2 &= \hat{x}_1 \varphi^{1/2} N^{-1/4} & \hat{x}_2' &= \hat{x}_1' \varphi^{-1/2} N^{-1/4} \\ \epsilon_2 &= \epsilon_1 N^{-1/2} & z_2 &= \varphi(z_1 - F_e) + F_a \\ \varphi &= X_2/X_1 = f_e f_a [X_1^2 + (z_1 - F_e)^2]^{-1} \end{aligned} \quad (5)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (4) und (5) wurden die verschiedenen Linsenelemente des Beschleunigers ausgewählt, ihre Wirkungsweise berechnet und ihre Lage festgelegt. Die dazugehörigen Matrizen sind im Anhang 8.1 aufgeführt.

## 2.2 Ionenquelle

Die Eigenschaften einer Ionenquelle bestimmen in einem hohen Maß das Verhalten eines gesamten Beschleunigers. Die von K.J. Hill und R.S. Nelson entwickelte Quelle (Harwell <sup>®</sup> Sputtered Ion Gun, Typ 705/2) /6/ gestattet, Ionen nahezu aller Elemente zu erzeugen. Die Quelle ist in Abb. 4 abgebildet. Sie arbeitet nach zwei verschiedenen Prinzipien:

Gasförmige Elemente werden direkt durch Elektronen ionisiert, die aus einer Tantalelektrode kommend auf die Kammerwand hin beschleunigt werden. Durch ein axiales Magnetfeld wird der Ionisierungsweg verlängert und gleichzeitig das Plasma komprimiert. Ionen von festen (auch pulverförmigen) Stoffen werden durch Zerstäubung erzeugt. Man befestigt die Probe auf einer Halterung, die bis zu - 2kV gegenüber der Entladungskammerwand vorgespannt ist. Durch Elektronenstoß erzeugte Gasionen zerstäuben die Probe. Anschließend können die so gewonnenen Atome ebenfalls ionisiert werden. Bei leichter flüchtigen Stoffen kann durch den Beschuß auch eine ther-



mische Verdampfung und anschließende Ionisation im Gasraum stattfinden. Die Ionenausbeute hängt sowohl vom Probenmaterial als auch vom verwendeten Quellengas ab. In diesem Fall besteht der Ionenstrahl aus verschiedenen Ionen.

Die Ionen werden von der Plasmagrenzfläche extrahiert. Dieser Vorgang ist der wichtigste im Verlauf des gesamten Strahltransportes /7/; hier werden Emittanz, Energieverteilung und Richtstrahlwert festgelegt. Während bei thermischer Emission von Elektronen und Ionen die Form und der Ort der Emissionsfläche festliegt, hängen diese beiden Größen bei einem Plasma als Quelle von Ionen von den Parametern der Entladung (Gasdruck, Magnetfeld, Entladungsstrom), dem Extraktionspotential  $U_{\text{extr}}$  und der Form der Elektrode ab /7/. Der Abstand  $d_E$  zwischen Plasma und Absaugelektrode stellt sich ein nach der Beziehung /8/:

$$d_E^2 = A U_{\text{extr}}^{3/2} j_p^{-1} \quad (6)$$

wobei für ebene Flächen  $A = 0,172 M_i^{-1/2} [\text{mm}^2 \text{ kV}^{-3/2} \text{ A cm}^{-2}]$ ,  $j_p$  die Ionenstromdichte und  $M_i$  die Ionenmassezahl ist. Für  $d_E > d_g = 4 \text{ mm}$ , dem geometrischen Abstand zwischen Emissionsöffnung und Absaugelektrode, erhält man eine nach innen gewölbte (konkave) Emissionsfläche. Es bildet sich vor der Quelle ein Cross-over aus /3/. Durch die hohe Ionen- und Neutralgasdichte in diesem Bereich erleidet der Strahl sowohl eine Raumladungs- als auch eine Energieverbreiterung. Dies wurde durch eine konvexe Plasmafläche vermieden /9/ ( $U_{\text{extr}}^{3/2} j_p^{-1} < 100 \text{ kV}^{3/2} \text{ A}^{-1} \text{ cm}^2$ ). Für die Berechnung des Strahltransportsystems wurde dieser Fall vorausgesetzt.

Es folgen technische Details und experimentelle Erfahrungen mit der Quelle: Die Art der Gasversorgung ist aus Abb. 13 zu entnehmen. Die Versorgungsleitung kann bis auf einige hundert Pa über die Ionenquelle evakuiert werden. Die Quelle arbeitet im Druckbereich von etwa 1 bis 40 Pa. Optimale Werte ergeben sich für etwa 4 Pa /10/. Die Kathode wird mit Gleichstrom (40 A) geheizt. Ihr Potential gegenüber der Entladungskammer wird über ein parallel geschaltetes Potentiometer festgelegt. Dadurch konnte gegenüber einer Wechselstromheizung eine bedeutend bessere Plasmastabilität erreicht werden. Die mittlere Lebensdauer der S-förmigen, 1 mm starken Tantal-kathode betrug nach mehrstündigem Vorglühen etwa vierzig Stunden.

Die Quelle wird vom Erdpotential aus mit Öl gekühlt. Beim Betrieb mit reinem Wasserstoff konnte die Quelle infolge extremer Wärmeentwicklung nur kurzzeitig gefahren werden. Zufriedenstellende Betriebsdauern ( $> 8$  h) wurden durch Beimischen von Edelgasen, insbesondere Krypton, gewonnen.

Die Emissionsöffnung betrug 1 mm. Die Emittanz  $\epsilon_0$  der Quelle beträgt 2,5 cm mrad bei 10 kV Extraktionsspannung (nach Firmenangabe); mit Hilfe von Strahlprofilmessungen in einem Cross-over und an einer weiteren Stelle wurde bei derselben Spannung eine Emittanz von 2,23 cm mrad bestimmt. Dieser Wert wurde für die Berechnung des Strahltransportsystems benützt. Für Argon wurde mit obiger Emittanz ein Richtstrahlwert nach Septier /12/ von  $\sim 2$  A cm<sup>-2</sup>sr erhalten.

## 2.3 Strahlführungssystem

### 2.3.1 Elektrostatische Optik

Die aus der Quelle extrahierten Ionen werden durch zwei elektrostatische Immersionslinsen beschleunigt und fokussiert. Das kommerzielle Drei-(Rohr)-Elektrodensystem ist in Abb. 4 zu sehen. Die besondere Endenform verhindert eine Aufladung der Glaswand durch den Strahl und damit eine Beeinflussung des Strahls. Der Rohrdurchmesser beträgt 67 mm, die Abstände zwischen den Elektroden sind 18 und 23 mm.

Die Spannung  $U_2$  der Mittelelektrode wird über ein hochohmiges Potentiometer (1,4 G $\Omega$ ) gewonnen. Die Änderung des Abgriffs wird über einen Motor ferngesteuert. Am heißen Ende des Potentiometers liegt eine Spannung  $U_{\text{EHT}}$  von maximal 150 kV an. Sie wird von einem Hochspannungsgerät HA 150 RP der Firma ZEISS erzeugt. Die Einstellgenauigkeit beträgt  $\pm 5$  %; die Kurzzeitkonstanz ist kleiner  $10^{-4}$  und die Langzeitdrift besser  $10^{-3}$ .

In Abb. 5 sind die Ergebnisse der Berechnung der optischen Eigenschaften des Systems dargestellt. Aufgetragen sind der Ort  $z_1$  des entstehenden Cross-overs, sowie seine maximale Ausdehnung und Divergenz, als Funktion der Stellung des Potentiometerabgriffes ( $U_2 = \gamma \cdot U_{\text{EHT}}$ ) bei einem Energiegewinn  $N = 8,8$ . Die Extraktionsspannung wird im Experiment dann so gewählt, daß

$$N = (U_{\text{EHT}} + U_{\text{extr}}) / U_{\text{extr}} \quad (7)$$

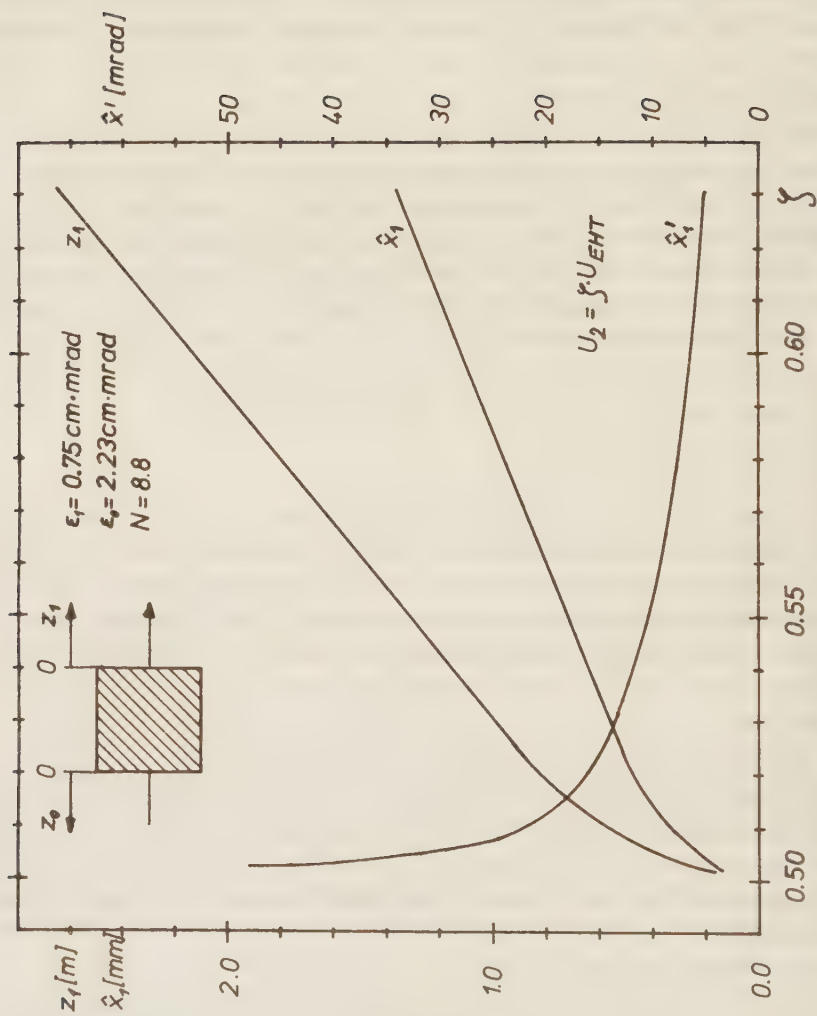


Abb.5: elektrostatische Optik (ionenoptische Rechnung)

erfüllt ist. Die Kurven zeigen, daß ein Cross-over nur bis zu einer Entfernung von maximal 2,60 m erzeugt werden kann (für einen größeren Abstand muß N geändert werden). Die hier erhaltenen Werte sind die Eingangsgrößen für die nachfolgenden Quadrupole und den Ablenkmagneten.

### 2.3.2 Magnetische Quadrupole

Das magnetische Quadrupol-Dublett ist ebenfalls kommerziell. Die Apertur beträgt 50 mm, die geometrische Länge 110 mm, der gegenseitige Abstand (Mitte - Mitte) 250 mm, der Spulenwiderstand  $6\Omega$  und der maximale Feldgradient 9 T/m bei einem Strom von 4 A.

In Abb. 6a bis 6d sind die Ergebnisse der "waist-to-waist transport" Rechnungen für einen einzelnen Quadrupol dargestellt.  $z_1$  bezeichnet den Ort des durch das elektrostatische Linsensystem erzeugten Cross-overs,  $z_2$  den Ort des durch den Quadrupol hervorgerufenen "waist"; beide Strecken werden von der Quadrupolmitte aus gerechnet. Der Parameter  $\Theta$  ist im Anhang definiert.

Den Quadrupolspulen wurden ohmsche Widerstände parallel geschaltet (Abb. 7a). Dadurch wurde erreicht, daß der Strom in je einem Spulenpaar verschieden groß sein konnte. Die damit hervorgerufene Feldasymmetrie (Abb. 7b) gestattet es, den gesamten Strahl um kleine Winkel aus der ursprünglichen Richtung abzulenken, ohne daß die Fokussierung verloren geht /11, 12/. Der Strahl kann damit trotz kleiner Fehljustierung durch feststehende Blenden geführt werden. Um weitere Justierfehler ausgleichen zu können, war der erste Quadrupol um die Mittelachse drehbar angeordnet.

### 2.3.3 Justiermagnete

Zur weiteren Strahlbeeinflussung wurden zwischen Quadrupole und Ablenkmagnet zwei kleine Justiermagnete eingefügt, die Ablenkungen in der Horizontal- und Vertikalebene ermöglichen. Sie wurden so dimensioniert, daß der Einfluß bei den ionenoptischen Rechnungen vernachlässigbar war.

Die Justiermagnete bestehen aus einem U-förmigen Joch, 70 mm langen und 25 mm hohen Polschuhen aus Baustahl und einer Kupferspule mit 450 Windungen. Bei einem Strom von 2,5 A wird ein Feld von 0,03 T auf der Mittelachse erzeugt. Die effektive Länge des Feldes beträgt 110 mm.

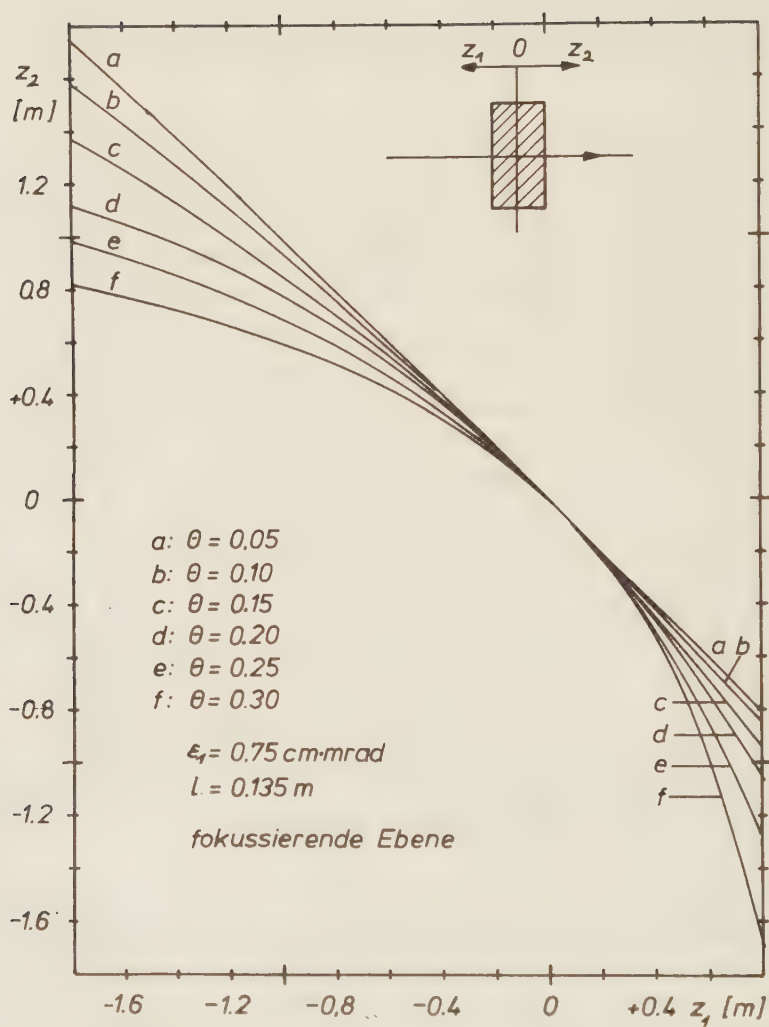


Abb. 6a-d: magnetischer Quadrupol (Rechnungen)

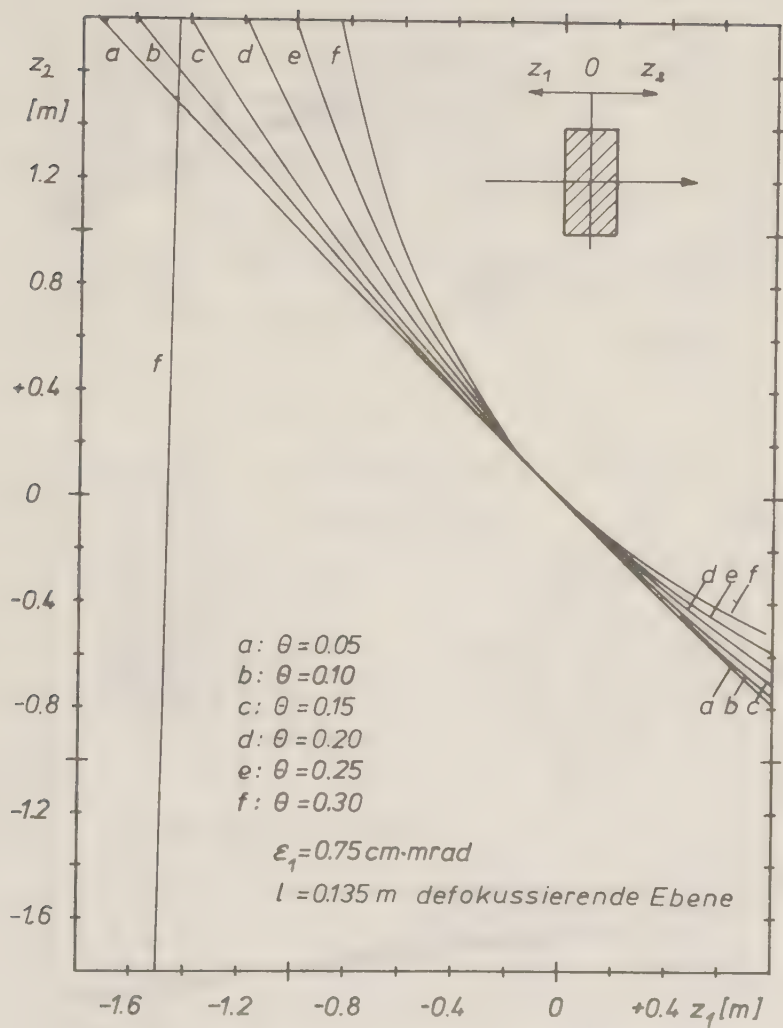


Abb. 6b

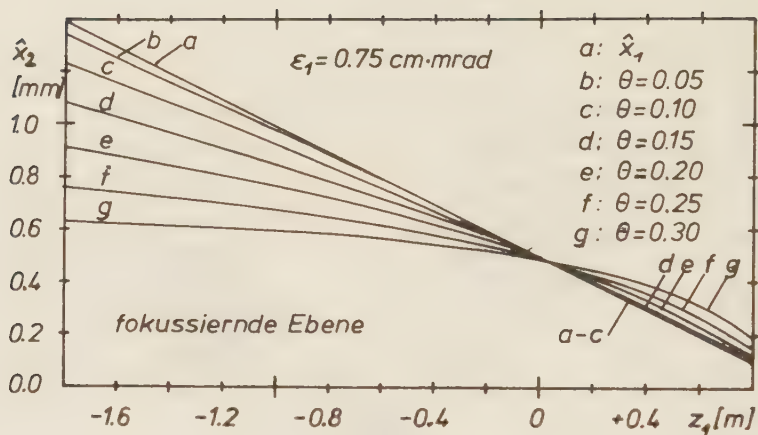


Abb. 6c

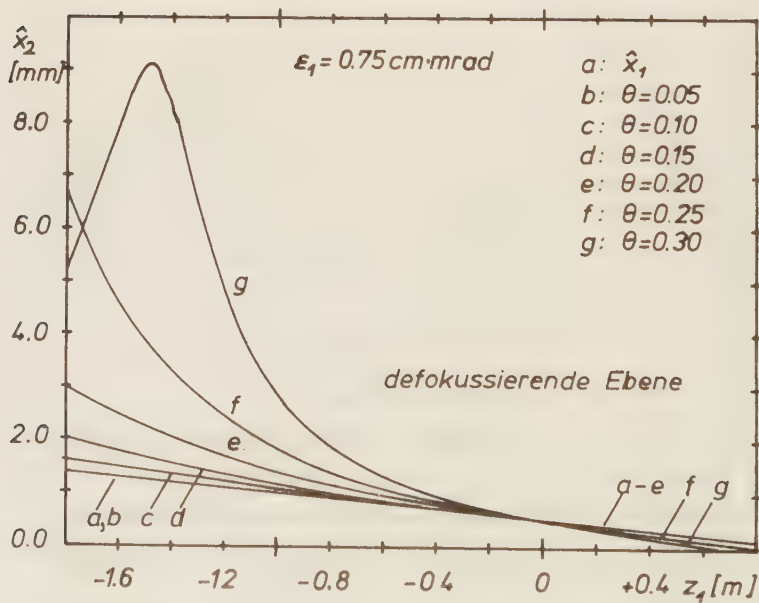
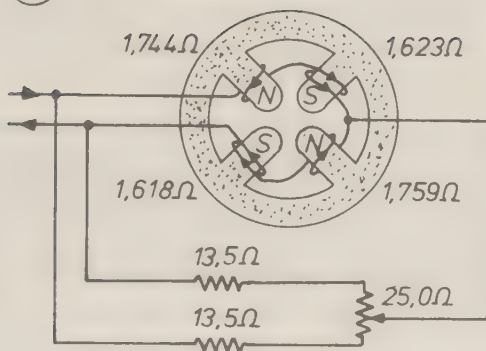


Abb. 6d

(a)



(b)

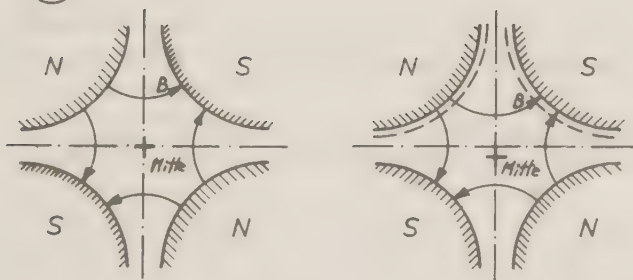


Abb. 7: asymmetrischer Quadrupol

### 2.3.4 Ablenkmagnet /13, 14/

Zur Impulsselektion des Teilchenstrahls und seiner Aufteilung auf die verschiedenen Experimentierplätze mußte ein Ablenkmagnet konstruiert werden. Seine technischen Daten sind in Tabelle 1, die ionenoptischen Daten in Tabelle 2 aufgeführt.

Der Magnet besteht aus einem H-förmigen Joch, zylindersymmetrischen Rogowski-Polschuhen (siehe weiter unten) und wassergekühlten Spulen. Joch und Polschuhe sind aus weichmagnetischem Stahl (Minimum Extra der DEW,  $B_{\max} \approx 2,15 \text{ T} / (15/)$ ) gefertigt.

Der Grund für die Wahl einer besonderen Polschuhform soll im folgenden näher erläutert werden:

Den Ablenkwinkel  $\alpha$  eines Strahls im Magnetfeld erhält man aus

$$\tan(\alpha/2) = \int_0^{\infty} B(r) dr / (B_0 \varphi_0) \equiv R_{\text{eff}} / \varphi_0 \quad (8)$$

wobei  $B_0$  die Induktion in der Mitte zwischen Polschuhen,  $\varphi_0$  der Ablenkradius und  $R_{\text{eff}}$  der effektive Feldradius ist. Für eine beliebige Masse  $M_1$  - Energie  $E_1$  - Ladungs( $n_1$ )-Kombination läßt sich die für einen gewünschten Ablenkwinkel nötige Induktion  $B_0$  berechnen /8/

$$B_0 [T] = 0.144 [\tan(\alpha/2)] [M_1 [\text{amu}] E_1 [\text{MeV}] / n_1^2]^{1/2} / R_{\text{eff}} [m] \quad (9)$$

Diese Formel läßt sich nur dann leicht anwenden, wenn  $R_{\text{eff}}$  konstant, d.h. von  $B_0$  unabhängig ist. Dies ist im allgemeinen nicht der Fall /13/. Ist jedoch die Begrenzungsfläche der Polschuhe eine Äquipotentialfläche (Rogowski-Form /16/), so bleibt  $R_{\text{eff}}$  konstant /17/. Durch diese Polschuhform werden auch Sättigungseffekte vermieden.

Durch das Streufeld wird der Teilchenstrahl in der Horizontalebene (Ablenkebene) um eine Strecke  $\Delta x$  versetzt und in der Vertikalebene findet eine Fokussierung  $\Delta(dy/dz)$  statt /13/. Für Rogowski-Polschuhe sind diese beiden Einflüsse vom absoluten Wert der Induktion  $B_0$  unabhängig. Die ionenoptischen Eigenschaften ändern sich damit bei festem Ablenkwinkel und Wechsel der Teilchenenergie nicht /13/.

Die Form des rotationssymmetrischen Polschuhs wurde aus der von Braams /16/ angegebenen Formulierung erhalten:

$$y = \pm(a/\pi)[\pi/2 + \exp(\pi x/a)] \quad (10)$$

mit  $a = 26,0$  mm und  $x = 0$  für  $R = 10,0$  cm (s.a. Abb. 8).

Über ein Computer-Programm wurde Formel (10) so ausgewertet, daß mit den Ausgabedaten die Herstellung der Polschuhe auf einer Drehbank gesteuert werden konnte. Abb. 8 zeigt ein Schnitt durch den Polschuh und den Feldverlauf für verschiedene Induktionen  $B_0$ . Die Auswertung des Integrals in Formel (8) ergibt einen effektiven Feldradius von 116 mm.

Die Querschnitte von Polschuh und Joch wurden großzügig dimensioniert, um lokale Sättigungserscheinungen zu vermeiden ( $B < 1,4$  T,  $B_{\max} = 2,15$  T). Ein möglichst gleichmäßiger Feldverlauf wird durch zwischen Pol und Joch eingebaute sogenannte Homogenizer (1 mm starke Messingbleche) erreicht /14/.

Aus thermischen Gründen /14, 18/ wurden die Erregerspulen in je zwei Kammern aufgeteilt. Die Wasserkühlung wurde so ausgelegt, daß bei voller Leistung ( $< 3$  kW) die mittlere Spulentemperatur um etwa  $40^\circ\text{C}$  über der Zimmertemperatur liegt (Wasser von  $12^\circ\text{C}$  und 2 bar). In die Spulenmitte wurden Thermoelemente verlegt, die den Erregerstrom bei einer Spulentemperatur  $> 80^\circ\text{C}$  abschalten.

Auf die Erregerspulen wurden noch Zusatzwicklungen aufgebracht. Hiermit kann das Magnetfeld durch Null gefahren werden; außerdem besteht die Möglichkeit, den Strahl um kleine Winkel hin- und herlaufen zu lassen. In Abb. 9 sind die Magnetisierungskurven für Haupt- und Zusatzspulen aufgetragen.

Die Ablenkammer besitzt je sieben Ein- und Ausgänge. Die Eingänge können zur Justierung der Strahlrohre oder zur Strahl- bzw. Targetbeobachtung während eines Experiments benützt werden. Die Kammer besteht aus Edelstahl.

Das Magnetfeld wird über ein stromkonstantes Netzgerät erzeugt. Die Kurzzeitstabilität ist besser  $10^{-6}$ , die Langzeitstabilität besser  $10^{-5}$  und die Stromkonstanz bei  $\pm 10\%$  Netzänderung ebenfalls besser  $10^{-6}$ .

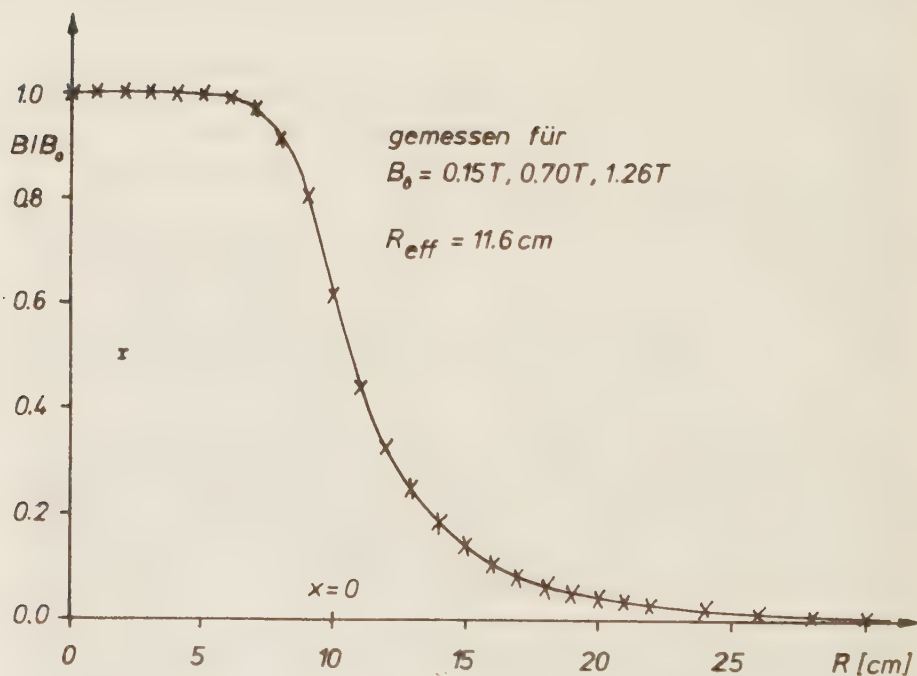
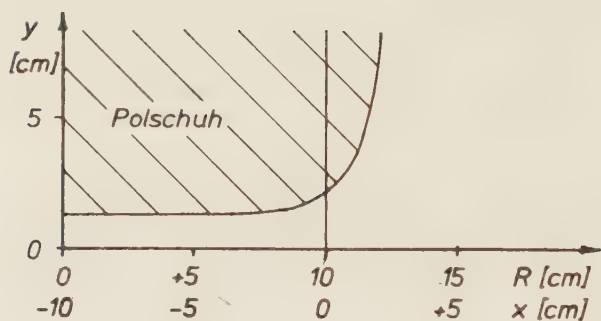


Abb.8: Ablenmagnet. Schnitt durch einen Polschuh  
Induktionsverlauf in der Ablenkebene

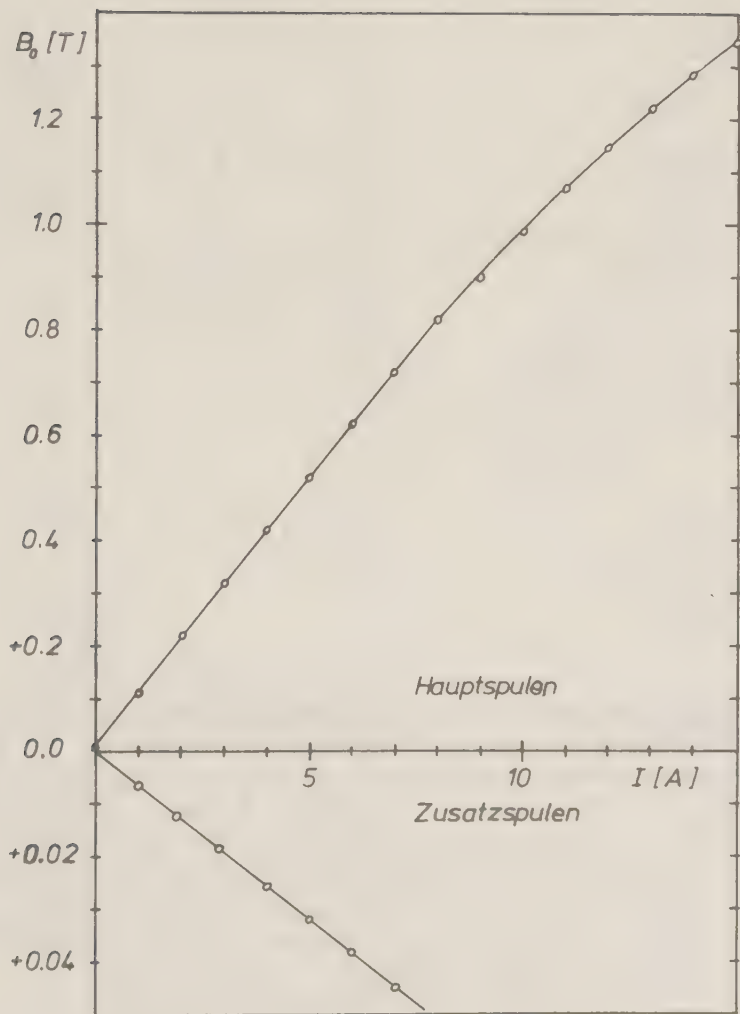


Abb. 9: Ablenkmagnet: Induktionskurven

Tabelle 1: Technische Daten des Ablenkmagneten (alle Maße in mm)

|                            |                 |
|----------------------------|-----------------|
| Masse                      | 550 kg          |
| Höhe x Breite x Tiefe      | 418 x 570 x 315 |
| Luftspalt                  | 26              |
| Polschuh: Höhe             | 120             |
| oberer $\emptyset$         | 244             |
| Homogenizer                | 1,0             |
| Jochquerschnitt            | 315 x 75        |
| je Spule: Höhe             | 105             |
| äußerer Radius             | 205             |
| Draht- $\emptyset$         | 2,24            |
| Wicklungen                 | 1162            |
| Widerstand                 | 5,43 $\Omega$   |
| max. Temperatur            | 373 K           |
| je Zusatzspule: Wicklungen | 80              |
| Widerstand                 | 9,75 $\Omega$   |
| max. Feld                  | 0,05 T          |
| max. Strom                 | 15 A            |
| max. Leistung              | 2,85 kVA        |
| max. Feld                  | 1,35 T          |

Das ionenoptische Verhalten des Ablenkmagneten kann den Abb. 10a - c entnommen werden. Die Lage  $z_1$  der Strahleinschnürung vor der Ablenkung ist die unabhängige Variable. Abb. 10a zeigt die Lage  $z_2$  des Cross-over nach der Ablenkung. Seine Größe  $\hat{x}_2$  ist in Abb. 10c aufgetragen. In Abb. 10b ist die Strahlgröße in der Horizontalebene ( $x_p$ ) und Vertikalebene ( $y_p$ ) am Ort der Blende 1 zu sehen. Hieraus kann die günstigste Lage  $z_1$  sowie die entsprechende Blendengröße bestimmt werden, wenn man die Akzeptanz des gesamten Blendensystems (siehe weiter unten) berücksichtigt.

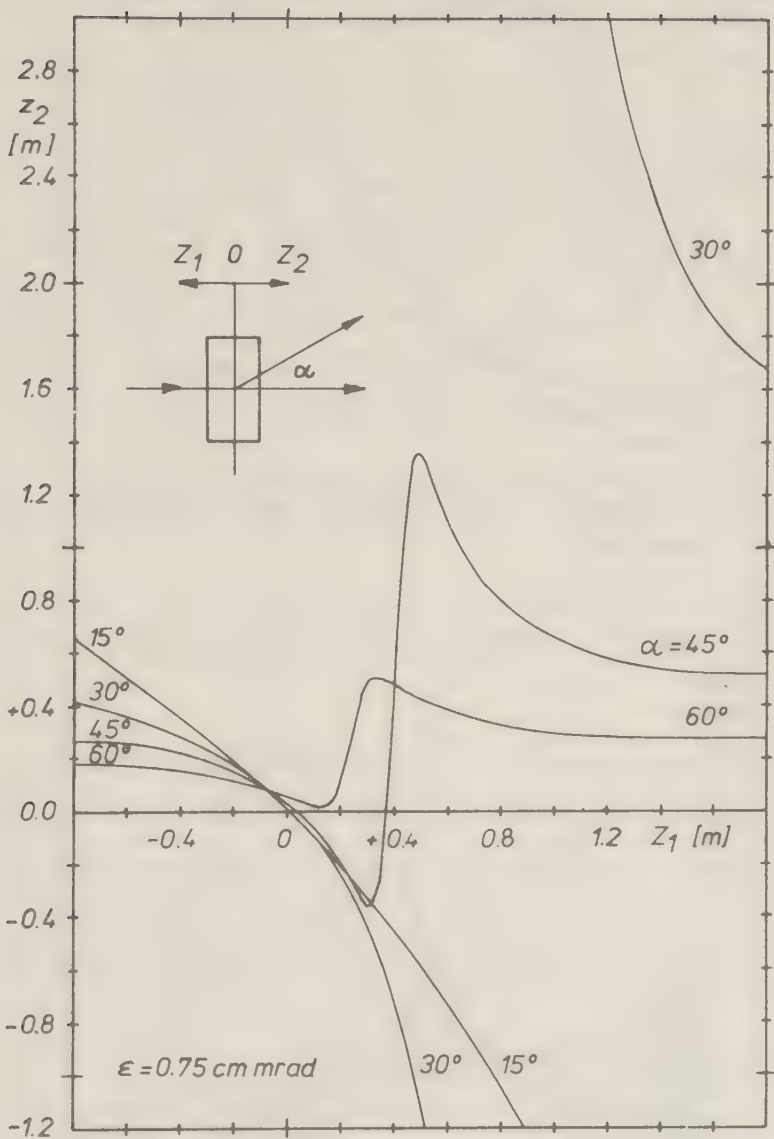


Abb. 10 a - c : Ablenkmagnet (Rechnungen)

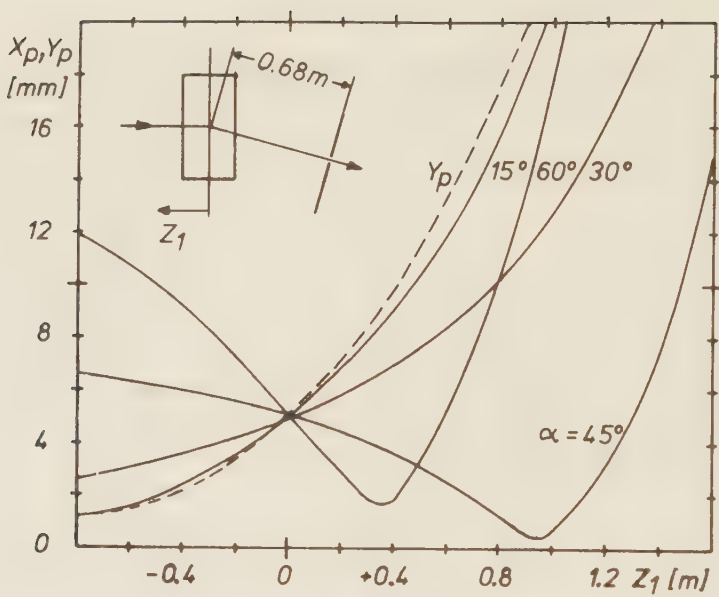


Abb. 10 b

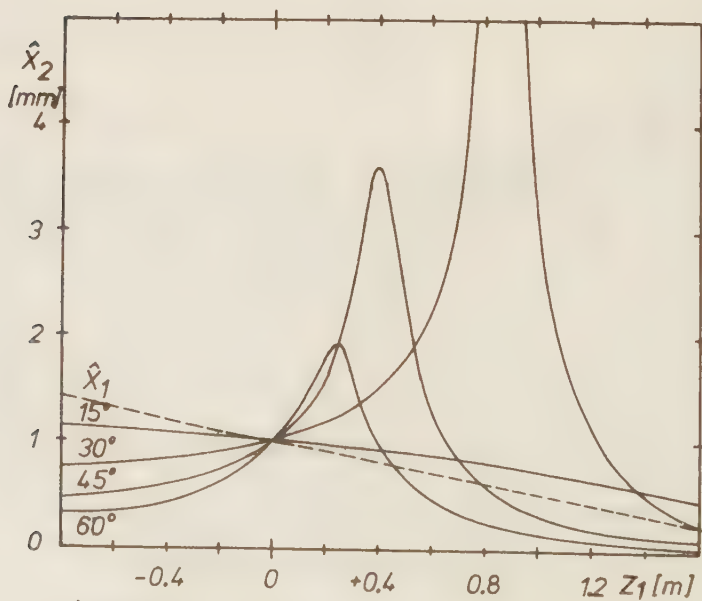


Abb. 10 c

Tabelle 2: Ionenoptische Daten des Ablenkmagneten

$$R_{\text{eff}} = 0,140 \text{ m} \quad B_{0 \text{ max}} = 1,35 \text{ T}$$

| $\alpha$                                                 | $\pm 15^\circ$       | $\pm 30^\circ$       | $+ 45^\circ$         | $+ 60^\circ$         | Bemerkung                                                                                       |
|----------------------------------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $P_0 [\text{m}]$                                         | 0,881                | 0,443                | 0,280                | 0,201                |                                                                                                 |
| $\bar{r}_H [\text{m}]$                                   | 3,40                 | 0,89                 | 0,40                 | 0,23                 | $(\Delta p)_1 = 0$                                                                              |
| $M_1 E_1 / n_1^2$                                        | 68,2                 | 17,2                 | 6,9                  | 3,6                  | Masse-Energie-Produkt<br>[amu - MeV]                                                            |
| $M_1$                                                    | alle                 | $\text{Cd}^+$        | $\text{Sc}^+$        | $\text{Na}^+$        | $E_1 = 0,15 \text{ MeV}$<br>$n_1 = 1$                                                           |
| $\left  \frac{\Delta p}{p} \right $                      | $1,75 \cdot 10^{-3}$ | $1,13 \cdot 10^{-3}$ | $1,79 \cdot 10^{-3}$ | $2,49 \cdot 10^{-3}$ | $\hat{x}_1 = x_2 =$<br>0,5 mm<br>$z_2 = 1,56 \text{ m}$                                         |
| $\left  \frac{\Delta M_1}{M_1} \right $                  | $4,5 \cdot 10^{-3}$  | $3,3 \cdot 10^{-3}$  | $4,6 \cdot 10^{-3}$  | $6,0 \cdot 10^{-3}$  | $\frac{\Delta E_1}{E_1} = 10^{-3}$ ;<br>$\hat{x}_1 = x_2 =$<br>0,5 mm<br>$z_2 = 1,56 \text{ m}$ |
| $\left  \frac{\Delta E_1}{E_1} \right $                  | $3,5 \cdot 10^{-3}$  | $2,3 \cdot 10^{-3}$  | $3,8 \cdot 10^{-3}$  | $5,0 \cdot 10^{-3}$  | $\Delta M_1 = 0$ ;<br>z.B. für $\text{H}^+$                                                     |
| $x_2 / \left( \left  \frac{\Delta p}{p} \right  \right)$ | 433,8                | 839,4                | 1185,1               | 1451,5               | $\hat{x}_1 \rightarrow 0$<br>$z_2 = 1,56 \text{ m}$                                             |

### 2.3.5 Mechanische Vorrichtungen

Die Emittanz des Ionenstrahls an der Targetposition wird durch ein mechanisches Blendensystem festgelegt. Das System besteht aus insgesamt vier Blenden. Die erste Blende - 450 mm von der Magnetmitte entfernt - hat einen Durchmesser von 5 mm. Sie verhindert, daß Ionen mit anderem Impuls, als sie der auf das Target fokussierte Strahl besitzt, auf die Wand des Blendenstrahlrohres treffen können. Die zweite und dritte Strahlblende sind horizontal und vertikal verschiebbar. Ein Einsatz erlaubt die Verwendung annähernd beliebiger Blendenöffnungen. Der Abstand beträgt 1000 mm. Diese beiden Blenden legen die Emittanz fest. Abb. 11 zeigt die geometrischen und optischen Verhältnisse für 1 und 3 mm  $\varnothing$ -Blendenöffnungen am Ort der zweiten und am Ort der dritten Blende. Hinter jeder Blende ist im Abstand von 3 mm ein Drahtrechteck. Durch die positive Vorspannung werden alle an den Blenden entstehenden Sekundärelektronen abgesaugt; diese können daher nicht mehr in den Strahl und mit ihm auf das Target gelangen. Die vierte Blende, isoliert angebracht, dient als Streublende, die verhindert, daß an der Blende 3 gestreute Ionen die eingestellte Emittanz verändern.

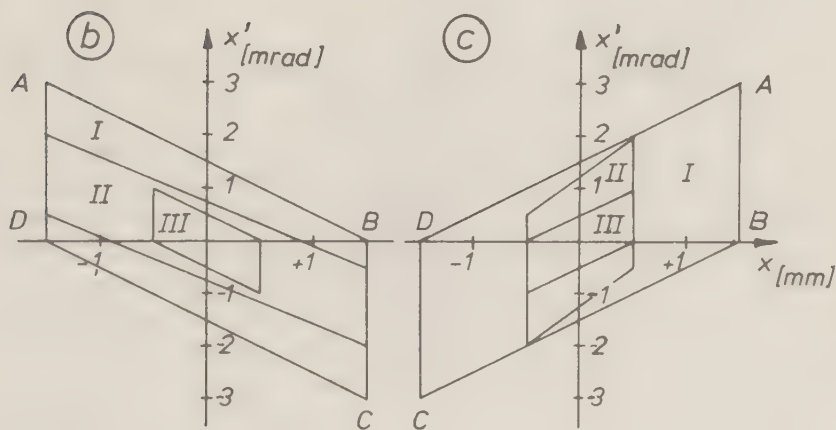
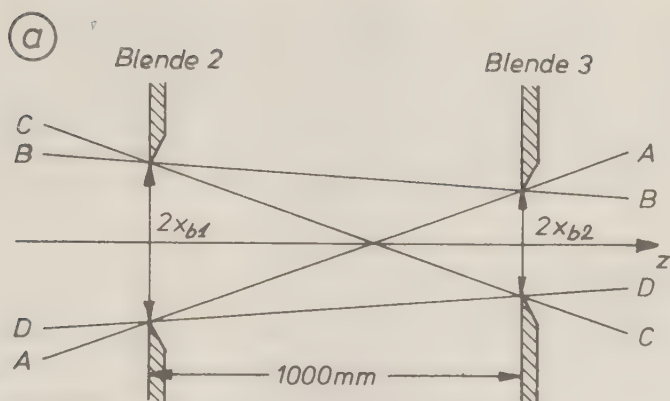
## 2.4 Meßstand

### 2.4.1 Targetkammer

Die Grundidee für die Konstruktion der Targetkammer war es, ein möglichst universell verwendbares bzw. erweiterungsfähiges UHV-System zu entwickeln. Kommt dieses System dann an verschiedenen Strahlrohren oder gar anderen Beschleunigern zum Einsatz, können im Bedarfsfall einzelne Komponenten, wie zum Beispiel Detektoren, Auger- und LEED-Meßvorrichtungen, auf dem Deckel befestigter Manipulator (mit justiertem Einkristall), oder gar die gesamte Kammer ausgetauscht werden.

Als Ausgangsmodell bot sich das von der Firma VARIAN (Palo Alto, California, U.S.A.) gebaute UHV-System VI-422 an: Targetkammer und Vakuumpumpen bilden eine durch einen Schieber trennbare Einheit.

In umfangreichen Experimenten wurde der Einfluß der Ionenpumpen auf die Messungen mit Halbleiterdetektoren und Röntgenproportional-



| Fall     | I             | II            | III           |
|----------|---------------|---------------|---------------|
| Blende 2 | 3 $\emptyset$ | 3 $\emptyset$ | 1 $\emptyset$ |
| Blende 3 | 3 $\emptyset$ | 1 $\emptyset$ | 1 $\emptyset$ |

Abb.11: Blendensystem: Geometrie (a), Akzeptanz (b) und Emittanz (c)

zählrohren untersucht. Bei Drücken größer  $10^{-3}$  Pa überwiegt die Strahlung, die aus den Pumpen kommt (im Energiebereich bis 5 keV) bei weitem. Unterhalb  $10^{-4}$  Pa gibt es keinerlei Schwierigkeiten. Um Messungen im Zwischenbereich einwandfrei zu ermöglichen, wurden Strahlungsschilde eingebaut. Für sehr genaue Messungen empfiehlt sich der Einbau einer doppelten Rastersperre /19/ oberhalb der Pumpe.

#### 2.4.2 Manipulator

Für die Durchführung der Experimente war es nötig, die Kristalle besser als ein Zehntelgrad gegenüber dem Ionenstrahl justieren zu können. Ferner sollte die Reproduzierbarkeit bei Veränderung des Polar- und Azimutwinkels besser als ein Zehntelgrad sein. Außerdem mußten noch die im Abschnitt 2.5 geforderten Bedingungen fürs Vakuum erfüllt werden.

Da kein Manipulator, der diesen Anforderungen genügt, erhältlich war, mußte einer entwickelt und hergestellt werden.

Abb. 12 zeigt den Manipulator, dessen Teile aus Edelstahl gefertigt sind. Mit der Drehachse (A) wird der Polarwinkel eingestellt. Ihr Drehbereich ist  $360^\circ$ . Nach vierzigmaligem Hin- und Herdrehen war die Reproduzierbarkeit besser  $0,04^\circ$ . Der Azimutwinkel wird über die Drehachse (B) verändert. Er kann ebenfalls einen Bereich von  $360^\circ$  überstreichen. Die Reproduzierbarkeit der Einstellung liegt hier bei  $0,1^\circ$ . Dreht man beide Achsen nur einsinnig, so lassen sich Winkel genauer  $0,01^\circ$  einstellen. Mit der Drehachse (C) kann ein Halbleiterdetektor um den Kristall ( $\pm 60^\circ$ ) geschwenkt werden; der Winkel zur Drehachse läßt sich ebenfalls verändern ( $40^\circ$  bis  $115^\circ$ ). Die Genauigkeit liegt bei  $\pm 0,5^\circ$ . Alle Drehdurchführungen sind balggedichtet. Die Winkeleinstellung der Achsen (A) und (B) erfolgt von außen über ein Getriebe mit mechanischem Zählwerk. Eine volle Umdrehung des Handrads entspricht  $0,1^\circ$  am Target für jede dieser Achsen. Die Drehung der beiden Achsen kann auch vollautomatisch über Schrittmotoren gesteuert werden /20/.

Die Oberfläche des Kristalls kann mit Hilfe der Vorrichtung (20 - 22) und einem nicht abgebildeten Anzeigeelement auf  $\pm 0,05$  mm in die Drehachse gebracht werden. Für die Messungen ist es ferner wichtig, daß die Oberflächennormale des Kristalls parallel der Drehachse (B) ist: Der Kristall ist auf einem kleinen Goniometer (24 bis 29)

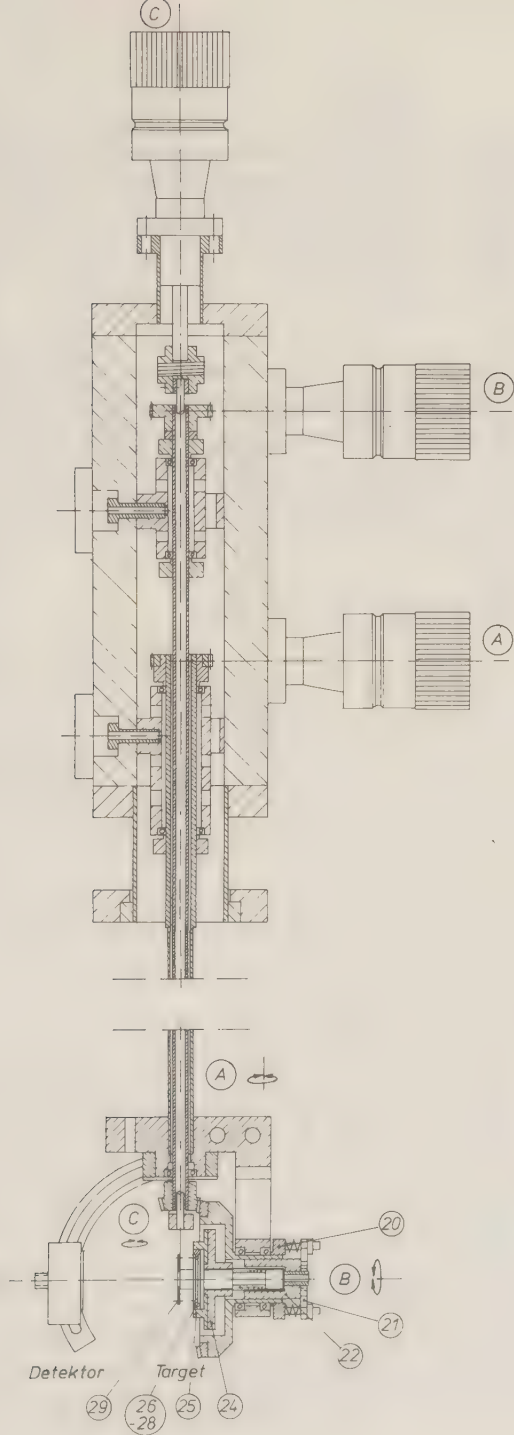


Abb. 12 Manipulator

befestigt, das mittels Laue-Aufnahmen so eingestellt werden kann, daß die Kristalloberfläche parallel der Grundfläche ist. Dieses Goniometer ist isoliert mit dem Manipulator verbunden und ermöglicht somit bei Temperaturen bis etwa 700 K Strommessungen. Eine Targetheizung mittels Elektronenbeschuß oder Heizspiralen ist vorgesehen.

Der Manipulator wird auf einem Balgzwischenstück UMD der Firma Vacuum Generators Ltd. (Hastings, England) befestigt. Diese Vorrichtung erlaubt eine Höhenverstellung von  $\pm 19$  mm, laterale Verschiebung in zwei zueinander senkrechten Richtungen um je  $\pm 8$  mm, sowie eine Kippung um  $\pm 4^\circ$  (ebenfalls in zwei zueinander senkrechten Richtungen).

## 2.5 Vakuumsystem /21, 22/

Abb. 13 zeigt die Schaltung der einzelnen Komponenten. Bei der Auslegung wurde der Schwerpunkt auf die Verhinderung des Auftretens von Kohlenwasserstoffen gelegt: Die an Oberflächen adsorbierten Kohlenwasserstoffe vernetzen unter Elektronen- oder Ionenbeschuß zu höher-molekularen Verbindungen /23 - 25/, die mit der Zeit zu dicken Schichten anwachsen können /25/. Diese Schichten können an den Elektroden des Beschleunigungssystems zu starken Feldverzerrungen und damit zu extremen Strahlstromstörungen führen. Am Target wird der Ionenstrahl in der "Polymerisat"-Schicht aufgestreut und abgebremst. Ferner kann bei Röntgenmessungen die entstehende Kohlenstoffstrahlung stören.

Die Flanschverbindungen sind vorwiegend mit Kupfer- oder Aluminiumringen abgedichtet. An Stellen, an denen dies nicht möglich ist, wurden Viton(A)-, Silikon- oder Teflon-O-Ringe verwendet. Der starke Gasanfall aus der Ionenquelle wird von einer Turbopumpe /26/ ( $S = 350$  l/s) abgepumpt, die stets von der Hochvakuumseite aus belüftet wird. Die Rückströmung aus der Vorpumpe wird durch ein in die Vorvakuumleitung geschaltetes Ionenbaffle /27/, das auf dem Prinzip des inversen Magnetrons beruht, verhindert. Am Strahlrohr befinden sich drei Ionengetterpumpen (je  $S = 20$  l/s) vom Diodentyp. Das Vorvakuum in der Targetkammer wird bis zu einem Druck von etwa 20 mbar von einer Membranpumpe ( $S = 4$  m<sup>3</sup>/h) erzeugt. Ein Druck von 0,1 Pa wird durch zwei stickstoffgekühlte Adsorptionspum-

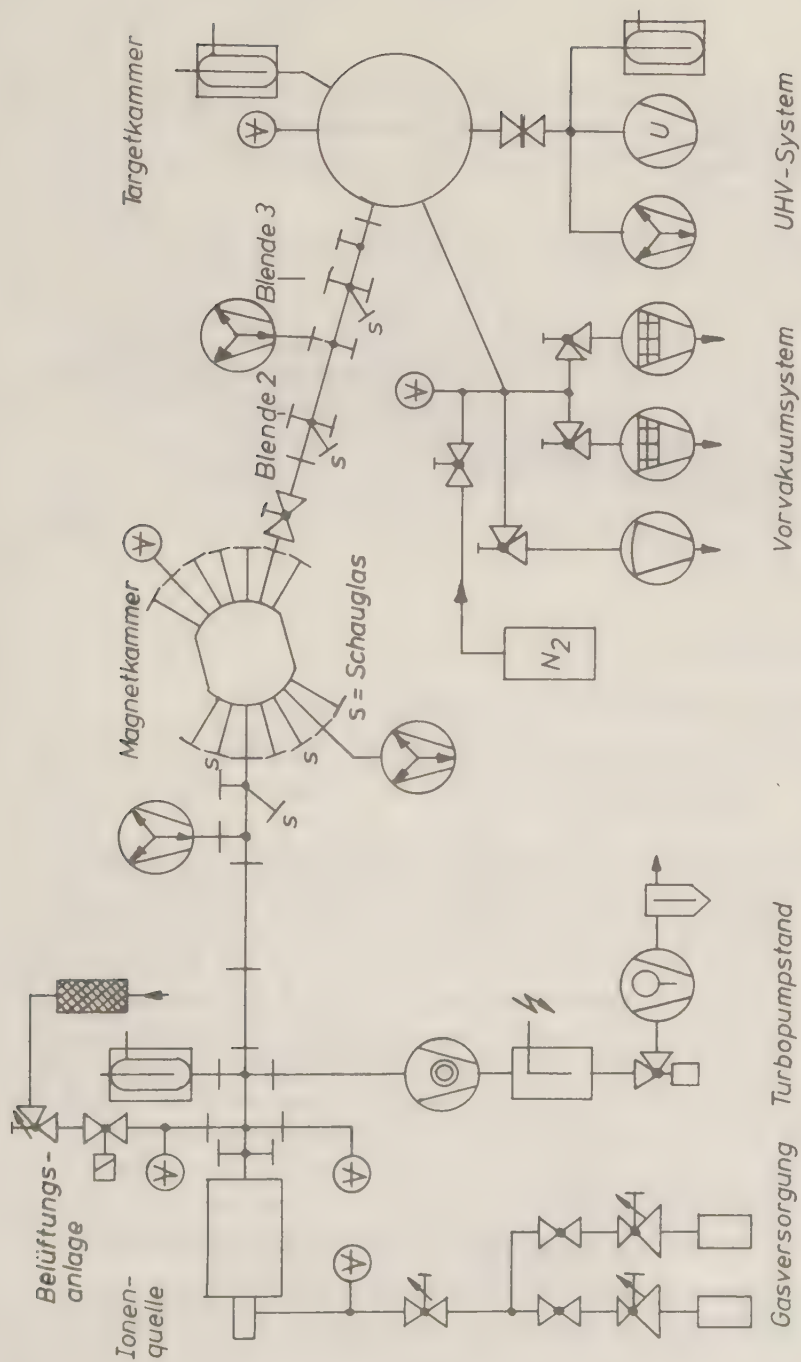


Abb. 13: Vakuumsystem

pen erreicht. Für ein Vakuum bis zu  $10^{-7}$  Pa (ohne Ausheizen) sind eine Ionenpumpe ( $S = 200$  l/s) vom Triodentyp /28/ und eine Titanverdampferpumpe ( $S = 22\,000$  l/s für  $N_2$ ) mit stickstoffgekühltem Mantel vorgesehen.

Der Druck im Beschleuniger liegt im Bereich von  $10^{-4}$  Pa. Das Blendenrohr ist von der Magnetkammer durch eine Druckblende ( $L = 2,3$  l/s) abgeblockt. Der Druck in der Targetkammer und im Blendenrohr war bei den weiter unten aufgeführten Experimenten durch die Permeation des Zählrohrgases durch das Zählrohrfenster bestimmt. Bei Verwendung einer  $2\text{ }\mu\text{m}$  ( $6\text{ }\mu\text{m}$ ) starken Kunststoffolie wurde im Druckbereich von  $10^{-5}$  Pa ( $10^{-6}$  Pa) gearbeitet.

Auf den Targets sowie auf den Elektroden konnte auch nach langer Beschußdauer mit Protonen keine "Polymerisationsschicht" festgestellt werden.

### 3. Meßanordnung

#### 3.1 Messung charakteristischen Röntgenstrahlung

In den Experimenten wurden die M- ( $\sim 1,77$  keV) und N- ( $\sim 215$  eV) Linien von Wolfram und die L ( $\sim 935$  eV)-Linie von Kupfer gemessen /29/.

Für die Erlangung eines möglichst großen Raumwinkels wurde als Röntgendetektor ein Durchflußzählrohr mit Endfenster-Geometrie /30/ benutzt, dessen Anodendraht verschiebbar war (Abb. 14) /31/. Dadurch konnte eine selektive Verstärkung /32/ von Röntgenlinien erreicht werden. Als Fensterfolien wurde  $2\text{ }\mu\text{m}$  starkes Makrofol (für Strahlung  $< 1$  keV) oder  $6\text{ }\mu\text{m}$  Hostaphan und als Zählrohrgas wurde P10 (90 % Argon, 10 %  $CH_4$ ) unter Atmosphärendruck verwendet. Die Durchlässigkeit der Folien und die Effektivität des Gases können Abb. 15 entnommen werden /33/. Zur Vermeidung eines hohen Rauschpegels ist in den Kopf des Zählrohres ein rauscharmer Vorverstärker in Dickfilmtchnik eingebaut. Die weitere Verarbeitung der Impulse erfolgte mit Hilfe konventioneller Impulselectronik.

Bei Protonenenergien größer 400 keV durchdringen rückgestreute Protonen die  $2\text{ }\mu\text{m}$  Zählrohrfolie. Die Wolfram-(N)-Linie kann dadurch nicht mehr gemessen werden. Zur Verhinderung dieses Effektes wurde



das Zählrohr in einen größeren Abstand vom Target gebracht. Eine Lochblende am ursprünglichen Ort des Zählrohrfensters legt den Raumwinkel der rückgestreuten Protonen fest. Ein Permanentmagnet erzeugt vor dem Zählrohr auf einer Länge von 7 cm ein Magnetfeld von 0,28 T. Dadurch werden sämtliche rückgestreuten Teilchen vom Zählrohr ferngehalten /20/.

### 3.2 Messung der rückgestreuten Protonen

Das Energiespektrum von massiven Targets rückgestreuter Protonen kann zur Tiefenanalyse benutzt werden, da Rückstreuenergie  $E_2$  und Eindringtiefe  $z$  des Projektils über den Energieverlust  $dE/dz$  eindeutig miteinander verknüpft sind /34/.

$$E_2 = E_1 k^2 - z (dE/dz) (k^2 / \cos \psi + 1 / \cos \beta) \quad (11)$$

wobei  $\psi$  der Winkel zwischen einfallendem Strahl und Oberflächennormale,  $\beta$  der Winkel zwischen Detektorachse und Oberflächennormale ist.  $E_1$  ist die Projektilenergie.

$$k = (\cos \phi_s + \sqrt{A^2 - \sin^2 \phi_s}) / (1 + A) \quad (12)$$

mit  $A = M_2/M_1$  dem Massenverhältnis von Targetatom zu Projektil. Da Strahlachse, Oberflächennormale und Beobachtungsrichtung in einer Ebene liegen, gilt für den Streuwinkel  $\phi_s$  im Laborsystem  $\cos \phi_s = -\cos(\psi + \beta)$ .

Gleichung (11) gilt für amorphe Targets. Detaillierte Untersuchungen /35/ an einkristallinen Targets haben gezeigt, daß diese Gleichung jedoch auch unter "Channeling"-Bedingungen in guter Näherung verwendet werden kann, da für ein rückgestreutes Teilchen der spezifische Energieverlust auch entlang niedrig-indizierter Richtungen annähernd dem in einem amorphen Target ist.

Im Experiment wurden planare Silizium-Oberflächensperrschichtdioden eingesetzt. Die Sperrschichttiefe betrug  $\sim 100 \mu\text{m}$ , so daß auch für Protonenenergien von 2,8 MeV die Nachweiswahrscheinlichkeit gleich eins war /36/. Bei Energien bis 100 keV wurden gekühlte Detektoren mit einer Fläche von  $25 \text{ mm}^2$  verwendet. Ihre Energieauflösung lag

bei 7 keV. Für höhere Energien wurden  $50 \text{ mm}^2$  Sperrschichtzähler mit  $\Delta E_2 = 15 \text{ keV}$  benützt.

Die Verarbeitung der Zählimpulse erfolgte mit konventioneller Elektronik.

### 3.3 Strahlstrommessung

Die in den Experimenten gemessenen Ausbeuten an charakteristischer Röntgenstrahlung und rückgestreuter Protonen wurden auf die Anzahl der auftreffenden Projektilen normiert. Die Strommessung wurde direkt am dicken Target vorgenommen. Die Sekundärelektronen wurden durch ein in einem Abstand von 3 mm vor der Oberfläche befindlichen Drahtrechteck unterdrückt. Die anzulegende Spannung wurde experimentell zu - 200 V bis - 500 V bestimmt.

Die Digitalisierung des Stromes in einem Integrator erlaubte es, daß die übrige Elektronik (Röntgennachweis, Teilchennachweis) und der Beschleuniger (Shutter) durch TTL-Impulse gesteuert werden konnten. Auf Grund der Isolierung des Targets ( $>1 \text{ G}\Omega$ ) konnte die Ladungsmenge besser 0,1 % bestimmt werden /37/.

## 4. Experimente zur Röntgenanregung durch schwere Ionen an Wolfram-Einkristallen

### 4.1 Vorbereitung

#### 4.1.1 Kristallpräparation

Wolfram-Einkristalle können, wie Davies et al. /38/ zeigten, einem idealen Kristall sehr nahe kommen. Die Kristallstruktur ist kubisch-raumzentriert (bcc). Weitere Angaben können Tabelle 3 entnommen werden. Die Kristalloberfläche kann mit Wolframoxid in einer Konzentration bis zu  $2 \cdot 10^{15} \text{ WO}_3/\text{cm}^2$  /39/ (das entspricht etwa einer Atomlage /40/) bedeckt sein.

Die Kristalle waren leicht elliptisch (10,5/9,5 mm) geformt und etwa 5 mm hoch. Die Oberflächennormale fiel in etwa mit der  $\langle 111 \rangle$  - Richtung zusammen. Die Reinheit betrug 99,996 %.

Der Kristall wurde nach folgendem Verfahren präpariert /41/: Mit einer Vibrationspoliermaschine wurde die Oberfläche zunächst mit



#### 4.1.2 Kristalljustierung

Der präparierte Kristall wurde zunächst auf dem kleinen Goniometer befestigt (siehe Abschnitt 2.4.2). In einer Laue-Apparatur wurde dann die  $\langle 111 \rangle$ -Richtung, auf  $\pm 0,5^\circ$  genau, senkrecht zur Montagefläche gestellt. Damit wird erreicht, daß die  $\langle 111 \rangle$ -Richtung mit der Drehachse (B) (Azimuthwinkel) zusammenfällt und sich nicht auf einem Kegelmantel bewegt. Das Goniometer wurde dann auf den Manipulator geschraubt.

Die Orientierung des Kristalls in Bezug auf den Strahl wurde mit Hilfe der Rutherford-Rückstreuung von Protonen gemacht (siehe weiter unten). Bei Projektilenergien kleiner 150 keV wurde zunächst mit Hilfe der vertikalen Drehachse ein Ausbeuteminimum gesucht. Mit der Kippachse wurde dann der Ort geringster Ausbeute eingestellt. Anschließend wurde der Polarwinkel auf  $\pm 10^\circ$  gedreht; die Ausbeute sollte nun in beiden Fällen gleich sein. Bei Drehung des Kristalls um den Azimuth ließ sich aus der Lage der auftretenden Ausbeuteminima eine Bezugsebene festlegen.

Da die Ausbeuteminima bei höheren Energien ausgeprägter sind, wurde für Energien größer 150 keV ein vereinfachtes Verfahren angewandt: Der Kristall wurde wieder mit der Horizontal- und der Kippachse bewegt. Beide Änderungen wurden an den Achsen in einem rechtwinkligen Koordinatensystem aufgetragen. Bei jeweils fester Kippachse wurde der Polarwinkel variiert. Gefundene Minima wurden auf dem Blatt markiert. Zueinander gehörende Punkte wurden durch Geraden miteinander verbunden. Der Schnittpunkt dieser Geraden bezeichnet die Lage der gesuchten Richtung. Die Geraden selbst verkörpern die Ebenen, die sich in dieser Richtung kreuzen.

Mit diesen Methoden konnte der Kristall auf besser  $0,1^\circ$  zum Strahl justiert werden.

#### 4.2 Winkelabhängigkeit der Ausbeute an rückgestreuten Protonen und der Wolfram-(N)-Strahlung parallel der $\langle 111 \rangle$ -Richtung

In diesem Experiment wurde ein Protonenstrahl variabler Energie auf einen Wolfram-Kristall gerichtet. Dieser wurde in einer Ebene, die  $16^\circ$  von einer (110)-Ebene entfernt liegt, durch die  $\langle 111 \rangle$ -Richtung gedreht; im Polardiagramm Abb. 16 ist der Weg mit (1) bezeichnet. Mit einem Halbleiterdetektor wurden um  $120^\circ$  zurückge-



Abb. 16 : Polardiagramm

streute Protonen gezählt. Ferner wurde noch die Ausbeute an Wolfram-(N)-Strahlung registriert.

Um einen Energiebereich der Protonen von 0,015 MeV bis 2,8 MeV überstreichen zu können, mußten die Experimente an verschiedenen Beschleunigern durchgeführt werden.

Die Messung mit 0,015 MeV wurde am Ionenbeschleuniger IB 50 der Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH München durchgeführt. Die Einstellgenauigkeit der Energie betrug  $\pm 2,5\%$ ; ihre Langzeitkonstanz ist besser  $10^{-3}$  /42/. Aus konstruktionsbedingten Gründen ergab sich eine Strahldivergenz von  $\pm 1^\circ$ . Das Proportionalzählrohr stand unter  $45^\circ$  zum Strahl. Pro Meßpunkt wurden für die Rückstreuung minimal 4 nC und für die Wolfram-(N)-Messung 100 nC benötigt.

Die Messungen im Energiebereich von 0,04 MeV bis 0,1 MeV wurden an dem im Abschnitt 2 beschriebenen Beschleuniger vorgenommen. Die Strahldivergenz war kleiner  $0,06^\circ$ . Das Zählrohr war unter einem Winkel von  $30^\circ$  zum Strahl in die Targetkammer eingebaut worden. Die Dosis pro Meßpunkt war mindestens 4 nC für die Rückstreuung und 200 nC für die Röntgenmessung.

Die Experimente mit Energien größer 0,4 MeV fanden am 3MV-Beschleuniger K3000 der Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH München statt. Für positive Ionen beträgt die Absolutgenauigkeit der Hochspannung  $\pm 0,5\%$ ; die Langzeitdrift ist  $\pm 3,0$  kV/h /43/. Die Strahldivergenz war besser  $0,05^\circ$ . Pro Meßpunkt wurde diesmal eine Ladungsmenge von 10 nC bzw. 4  $\mu$ C für die Messungen mit dem Halbleiterdetektor bzw. Zählrohr registriert.

Der statistische Fehler für alle Meßpunkte ist kleiner 2 %. Die Meßkurven sind in Abschnitt 5.1.6 abgebildet.

#### 4.3 Messung der Wolfram-(M)-Linie und der Kupfer-(L)-Linie an einem mit Kupfer dotiertem Wolfram-Kristall

Nach der Justierung des Wolfram-Kristalls wurde zunächst die Winkelabhängigkeit der Ausbeute an Wolfram-(M)-Strahlung für die  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 110 \rangle$ -Richtung gemessen. Die Wege sind im Polardiagramm (Abb. 16) mit ①, ② und ④ markiert. Die Divergenz des 85 keV-Protonenstrahls war kleiner  $0,06^\circ$ . Pro Meßpunkt

wurden 3  $\mu\text{C}$  registriert. Das Zählrohr stand unter  $30^\circ$  zur Strahlachse.

Anschließend wurde der Kristall in eine hochindizierte Richtung (nahe  $\langle 111 \rangle$ ) gedreht und mit insgesamt 700  $\mu\text{C}$  Kupferionen dotiert. Bei einem Strahldurchmesser von 5 mm sind das  $2,2 \cdot 10^{16}$  Teilchen/ $\text{cm}^2$ . Während der Implantation wurde die Cu-(L)-Linie gemessen; die Wolfram-(M)-Linie war nicht zu beobachten. Die Sättigungskonzentration wurde bei  $N_p = 1,8 \cdot 10^{16}$  Teilchen/ $\text{cm}^2$  erreicht. Der Strahldurchmesser wurde dann auf 1 mm verkleinert. Die Winkelabhängigkeit der Kupfer-(L)-Linie beim Beschuß des Kristalls mit 85 keV-Cu<sup>+</sup>-Ionen wurde auf den gleichen Wegen wie bei dem Protonenexperiment gemessen. Pro Meßpunkt wurden  $2,5 \cdot 10^{14}$  Cu<sup>+</sup>-Ionen/ $\text{cm}^2$  benötigt.

Das eingangs geschilderte Experiment mit Protonen wurde nach den Kupfermessungen wiederholt.

Die Meßkurven und deren Diskussion finden sich in Abschnitt 5.2.3.

#### 4.4 Änderung der protoneninduzierten W-(M)-Ausbeute beim Übergang von axialer zu planarer Gitterführung

Der justierte Wolframkristall wurde mit einem 100 keV-Protonenstrahl beschossen. Die Strahldivergenz war kleiner als  $0,06^\circ$ . Mit dem Proportionalzählrohr wurde die Wolfram-(M)-Linie gemessen. Zuerst wurde der Kristall längs der (110)-Ebene durch die  $\langle 111 \rangle$  und  $\langle 110 \rangle$ -Richtungen gedreht. Anschließend wurde von der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung in die (100)-Ebene gefahren. Der Verlauf der Messung kann aus Abb. 16 (Kurven ② und ③) entnommen werden. Bei einer Stromstärke von 5 nA wurden pro Meßpunkt minimal 200 nC aufsummiert.

#### 4.5 Auswertung der Meßergebnisse

Wie weiter unten erklärt werden wird, müssen die einzelnen Meßkurven, um einen Vergleich anstellen zu können, auf die gleiche Tiefe im Kristall normiert sein. Diese Tiefe ist bei der Röntgenstrahlung durch die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes und die Absorption der betreffenden Strahlung im Kristall vorgegeben. Die Messungen der rückgestreuten Protonen wurden mit Hilfe der Formel (11) dieser Tiefe angepaßt. In Abb. 17 ist die Wolfram-(N)-Linie gezeigt, wie sie beim Beschuß mit 0,4 MeV Protonen in einer hochindizierten und der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung zu beobachten ist.

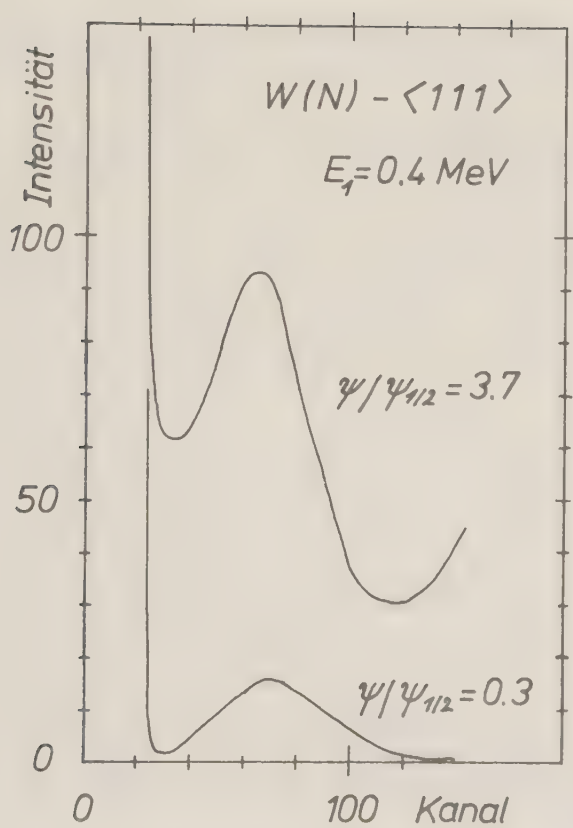


Abb. 17: Wolfram-(N)-Linie

Röntgenspektren dieser Art wurden durch Anpassen eines Polynoms an das Rauschen und einer Gaußkurve an die Röntgenlinien ausgewertet.

## 5. Diskussion

### 5.1 Stoßparameterabhängigkeit der Ionisierungswahrscheinlichkeit für die Anregung der Wolfram-(N)-Linie

In diesem Experiment sollte die Coulomb-Anregung ultraweicher Röntgenstrahlung untersucht werden. Wie in Abschnitt 5.2.1 gezeigt werden wird, kann weiche und ultraweiche Röntgenstrahlung für Lokalisierungsexperimente geeignet sein. Jedoch muß hierfür die Stoßparameterabhängigkeit der Ionisierungswahrscheinlichkeit bekannt sein; ihre Kenntnis ist aber auch aus atomphysikalischen Gründen interessant. Es kann damit die Erweiterung der SCA-Theorie (siehe Abschnitt 5.1.2) auf äußere Schalen getestet werden.

Wie Tabelle 3 zu entnehmen ist, ist der N-Schalen-Radius jedoch noch größer als der Thomas-Fermi-Abstand für Protonen. Damit sind für die N-Anregung durch Protonen sicherlich Streuwinkel unter  $1^\circ$  vorhanden, die eine Koinzidenzmethode ausschließen. Als Ausweg bietet sich der Gitterführungseffekt (Channeling) an.

Im folgenden wird zunächst auf die Coulomb-Anregung näher eingegangen. Mit Hilfe einer halbklassischen Näherung zur Berechnung des Ionisationswirkungsquerschnittes wird die Stoßparameterabhängigkeit für die Wolfram-N<sub>4,5</sub>-Schale gewonnen. Nach einer Einführung in den Gitterführungseffekt wird eine Monte-Carlo-Simulation zur Berechnung der Röntgenausbeute unter "channeling"-Bedingungen gezeigt. Ein Vergleich zwischen Theorie und Experiment schließt dieses Kapitel ab.

#### 5.1.1 Ionisationsprozeß

In diesem Abschnitt soll die Frage untersucht werden, welche Röntgenübergänge wesentlich zur N-Linie beitragen und welche Primäriodisation damit verbunden ist. Die Bindungsenergien /44/ der sieben N-Niveaus und der Fluoreszenzausbeute /45/ sind in Tabelle 4 wiedergegeben.

Tabelle 4

| Niveau         | Bindungsenergie | Fluoreszenzausbeute |
|----------------|-----------------|---------------------|
| N <sub>1</sub> | 595 eV          | $7,5 \cdot 10^{-5}$ |
| N <sub>2</sub> | 492 eV          | $8,0 \cdot 10^{-5}$ |
| N <sub>3</sub> | 425 eV          | $6,9 \cdot 10^{-5}$ |
| N <sub>4</sub> | 259 eV          | $1,2 \cdot 10^{-4}$ |
| N <sub>5</sub> | 245 eV          | $1,3 \cdot 10^{-4}$ |
| N <sub>6</sub> | 37 eV           | $7,2 \cdot 10^{-6}$ |
| N <sub>7</sub> | 34 eV           | $7,2 \cdot 10^{-6}$ |

$$\sigma_I(M_{4,5}) : \sigma_I(M_{2,3}) : \sigma_I(M_1) = 1:0,2:0,05$$

$$\sigma_I(L_{2,3}) : \sigma_I(L_1) = 1:0,3$$

Aus der beobachteten Energie von etwa 210 eV der Wolfram-(N)-Strahlung kann geschlossen werden, daß die Ionisation der N<sub>6,7</sub>-Schalen hierfür nicht verantwortlich ist. Um ein Gefühl für die Abhängigkeit des Ionisationswirkungsquerschnittes von der Bindungsenergie bei Protonenenergien in der Umgebung des Wirkungsquerschnittmaximums zu bekommen, wurden die entsprechenden Verhältnisse bei den L- und M-Unterschalen untersucht. Wirkungsquerschnitte für Unterschalen, die sich nur durch die Spin-Bahn-Kopplung unterscheiden, wurden addiert. Die numerischen Werte wurden /46/ entnommen. Das Ergebnis ist aus Tabelle 4 ersichtlich. Ein Vergleich dieser Werte und der Fluoreszenzausbeuten für die N-Unterschalen lassen es als gerechtfertigt erscheinen, daß der Hauptbeitrag zur beobachteten Röntgenlinie von der Ionisation der N<sub>4/5</sub>-Niveaus herrührt.

### 5.1.2 Theorie

Die Ionisation innerer Schalen wird im folgenden mit der semiklassischen Näherung (SCA) beschrieben. Sie gestattet sowohl den totalen Wirkungsquerschnitt als auch differentielle Wirkungsquerschnitte zu berechnen.

Bang und Hansteen /47/ formulierten die Theorie für die K-Schale. Kocbach /48, 49/ führte eine Erweiterung auf alle (vollständig besetzten) Schalen durch. Werte für den totalen Wirkungsquerschnitt, sowie für die Ionisationswahrscheinlichkeit als Funktion des Stoßparameters wurden für die K-, L- und M-Schale gerechnet /46/.

Die die Ionisierung bestimmende Wechselwirkung ist die Coulombwechselwirkung zwischen Projektilkern und Atomelektron. Die Störung wird als klein angesehen ( $Z_1 \ll Z_2$ ), so daß als Entwicklungsbasis die ungestörten Atomwellenfunktionen benützt werden können. Dann ergibt sich in zeitabhängiger Störungsrechnung erster Ordnung für die Übergangsamplitude

$$a = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega_{if}t) \langle f | \frac{Z_1 e^2}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} | i \rangle \quad (13)$$

mit  $\hbar\omega_{if} = E_f - E_i$ ;  $\vec{R}(t)$  ist der internukleare Abstand und  $\vec{r}$  die Ortskoordinate des Atomelektrons. Die Ionisierungswahrscheinlichkeit  $I(b)$  ist  $I(b) = |a|^2$  und der totale Wirkungsquerschnitt  $\sigma = \int 2\pi b db |a|^2$ . Unter Verwendung von geeignet abgeschirmten Wasserstoff-Wellenfunktionen für den Anfangszustand  $|i\rangle$  (Einelektronennäherung) und von Coulomb-Wellenfunktionen für den Kontinuumszustand  $|f\rangle$  ergibt sich /48/

$$I(b) = \frac{2j_A + 1}{2l_A + 1} \frac{2Z_1^4 e^4 M_1}{\hbar^4 E_1} \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dE_f D_l(b) \quad (14)$$

$j_A$  und  $l_A$  sind Gesamt- und Bahndrehimpuls des Anfangszustandes.  $Z_1$ ,  $M_1$  und  $E_1$  sind die Kernladungszahl, Masse und Energie des Projektils. Eine detaillierte Rechnung (siehe Anhang 8.2) zeigt, daß

$$D_l(b) = (2l+1)(2l_A+1) \sum_{L=0}^{l+l_A} \begin{pmatrix} l & l & l_A \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sum_{M=0}^L (2 - \delta_{M0}) \left| \mathcal{T}_{l, l_A}^{LM}(b) \right|^2 \quad (15)$$

Mit der im Anhang angegebenen Skalierung ergibt sich

$$\mathcal{T}_{l,l_R}^{LM}(b) = \int_{q_R}^{\infty} s ds A_M^L(q_R, s, b) F_{k_R l}^L(s) \quad (16)$$

$$A_M^L(q_R, s, b) = s^{-2} \left[ (2L+1) \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right]^{1/2} P_L^M(q_R/s) J_M(b\sqrt{s^2 - q_R^2}) \quad (17)$$

$$F_{k_R l}^L(s) = \int_0^{\infty} r_R^2 dr_R R_l(-ik_R r_R) R_{n_R l_R}(r_R) j_L(sr_R) \quad (18)$$

Unter Verwendung der Radialanteile der oben genannten Wellenfunktionen für  $R_l$  und  $R_{n_A l_A}$  kann das Integral  $F$  nach etwas mühsamer Rechnung analytisch dargestellt werden.

$$\begin{aligned} F_{k_R l}^L(s) = & \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(2l+3)}{\Gamma(l+3/2)} \bar{N}(k_R, l) \bar{N}_{n_R l_R} \frac{k_R^l s^l}{[1+(s-k_R)^2]^{2l+3}} \times \\ & \times \sum_{B=-(n_R-1)}^{n_R-1} \left\{ \sum_{\nu=l_R}^{n_R-1} a_{n_R l_R}^{\nu} C_{\Delta, \nu}^B(l, s) \right\} F_2\{l+1, B\} \\ F_2\{l+1, B\} = & F_2\{2l+3; l+1-B, l+1+in_R/k_R; 2l+2, 2l+2; \\ & 2is/[1+i(s-k_R)]; -2ik_R/[1+i(s-k_R)]\} \end{aligned} \quad (19)$$

Der gesamte, etwas längliche Ausdruck für die Ionisierungswahrscheinlichkeit, sowie eine Erläuterung der einzelnen Größen finden sich im Anhang 8.2.

### 5.1.3 Numerische Rechnungen für die $N_{4/5}$ -Schale von Wolfram

Für die numerische Auswertung der Ionisationswahrscheinlichkeit  $I(b_A; n_A, l_A, j_A; Z_A; E_1)$  wurde ein Rechenprogramm in FORTRAN (extended version) geschrieben. Es können ohne Einschränkung alle Eingabegrößen variiert werden. Eine Kontrolle des Rechenprogramms erfolgte sowohl durch Nachrechnung per Hand als auch durch Vergleich mit bekannten Werten der K-Schale /50/.

Die Rechnungen für die  $N_{4/5}$ -Unterschalen von Wolfram und Protonenenergien von 0,015 MeV, 0,047 MeV, 0,4 MeV und 2,8 MeV wurden an der TR 440 des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften durchgeführt.

Da die Ionisationsniveaus der  $N_4$ - und der  $N_5$ -Schale sehr nahe beieinander liegen ( $E_{N4} = 258,8 \pm 0,4$  eV,  $E_{N5} = 245,4 \pm 0,4$  eV /44/) und eine experimentelle Trennung nicht möglich ist, wurde die Ionisationswahrscheinlichkeit für bei Niveaus gleichzeitig berechnet unter Einführung eines effektiven Ionisationsniveaus

$$E_{NM} = [(2j_{N4}+1)E_{N4} + (2j_{N5}+1)E_{N5}] / (2j_{N4}+2j_{N5}+2) \quad (20)$$

$$I(b; N_4+N_5) = \frac{2(l_{N4}+l_{N5}+1)}{2l_{N4}+1} \frac{2Z_A^2 e^4 M_A}{\hbar^2 E_1} \int_0^\infty dE_f \frac{dI(E_{NM})}{dE_f} \quad (21)$$

Dieses Verfahren wurde an Werten der M-Schale /46/ überprüft. Die Differenz der Bindungsenergien ist hier bedeutend größer als bei der N-Schale. Der maximale Fehler gegenüber der Rechnung für die einzelnen Niveaus liegt bei 2 %.

Die effektive Kernladungszahl wurde nach Hartree /51/ berechnet. Die Ausdrücke für  $\hat{C}_{\Delta l, \nu}^R$  ( $\nu = 2, 3; \Delta l = 0, \pm 2; B = [-3, +3]$ ) wurden /48a/, sowie Tabelle 11 entnommen. Die Verwendung nichtrelativistischer Wasserstoffwellenfunktionen ist dadurch zu rechtfertigen, da sich die Erwartungswerte  $\langle r^n \rangle$  der 4d-Schale für die relativistischen Funktionen nur um einige Prozent von denen der nichtrelativistischen Funktionen unterscheiden /52/.

Tabelle 5 gibt einen Überblick über für die Berechnung wichtige Werte.

Tabelle 5

|                                     |                                                     |                        |
|-------------------------------------|-----------------------------------------------------|------------------------|
| $Z_1 = 1$                           | $n_A = 4$                                           | $\bar{N}_{42}^2 = 0,8$ |
| $Z_2 = 74$                          | $l_A = 2$                                           |                        |
| $Z_A = 41,0$                        | $j_{N4} = 3/2$                                      |                        |
| $\alpha_A = 193,76 \text{ nm}^{-1}$ | $j_{N5} = 5/2$                                      |                        |
| $E_{AM} = 250,76 \text{ eV}$        | $e^2 = 14,4 \cdot 10^7 \text{ MeV} \cdot \text{nm}$ |                        |

Im ersten Rechengang wurde  $D_1(k_A; 42; b_A)$  für festen Stoßparameter und Drehimpuls  $l$  des Kontinuumszustandes als Funktion der Energie  $E_f$  des Elektrons im Kontinuum berechnet. Einige Beispiele sind in Abb. 18 gezeigt. Die maximale Energie liegt für Projektilgeschwindigkeiten unterhalb der Bahngeschwindigkeit der gebundenen Elektronen ( $E_1 < 0,4 \text{ MeV}$ ) etwa in der Größe der Bindungsenergie. Für  $v_1 > v_{\text{orbital}}$  erhält man Energien, die etwa so groß sind wie die in einem Stoß mit einem freien Elektron übertragbare Energie  $T_{\text{max}} \approx 4(m_e/M_1)E_1$ .

Im zweiten Rechenschritt wurde über  $E_f$  integriert. Man erhält jetzt die (partielle) Ionisationswahrscheinlichkeit als Funktion des Stoßparameters bei einer festen Drehimpulsquantenzahl  $l$ .

Vorgang eins und zwei wurden bis zu solchen Stoßparametern  $b_{\text{max}}$  ausgeführt, bei denen  $I(b_{\text{max}}, l) < 0,001 \max(I(b, l))$  erfüllt ist. Abb. 19 gibt einige Beispiele an. Durch Summation über  $l$  erhält man dann endgültig die gesuchte Ionisationswahrscheinlichkeit  $I(b)$ . Man sieht, daß die Hauptbeiträge von  $l = 2$  und  $3$ , d.h. vom Monopol- und Dipolterm der Entwicklung nach  $l$ , kommen. Der totale Wirkungsquerschnitt für ein festes  $l$  ergibt sich aus der Integration  $\sigma_l = 2\pi \int b db I(b, l)$ . Die Summation über  $l$  wurde dann abgebrochen, wenn  $\sigma_l$  weniger als 1 Prozent zum totalen Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  beitrug oder wenn  $I(b_{\text{max}}) < 0,001 \max(I(b))$  wurde. Durch diese Beschränkung mußte maximal bis zu einem  $l = 11$  gerechnet werden.

In Abb. 20 ist die bei  $b = 0$  normierte Ionisationswahrscheinlichkeit  $1(b)$  für die  $N_{4/5}$ -Schale in Wolfram als Funktion des Stoßparameters für die vier ver-

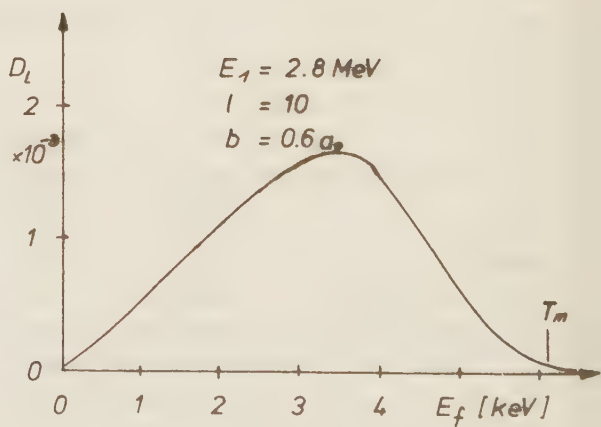
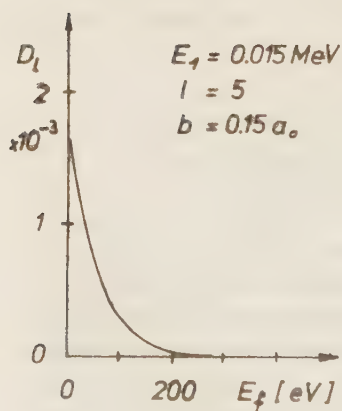
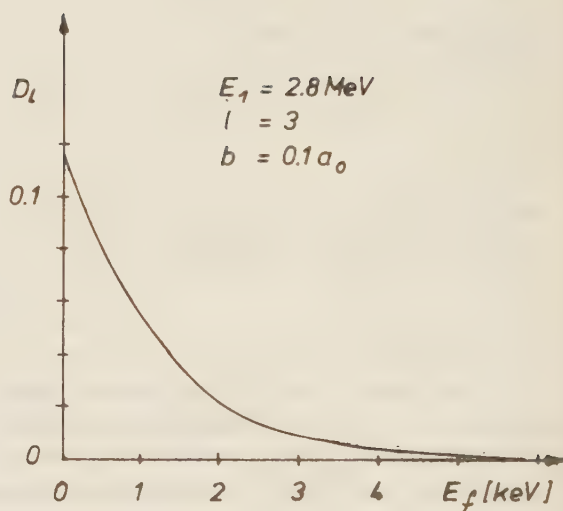
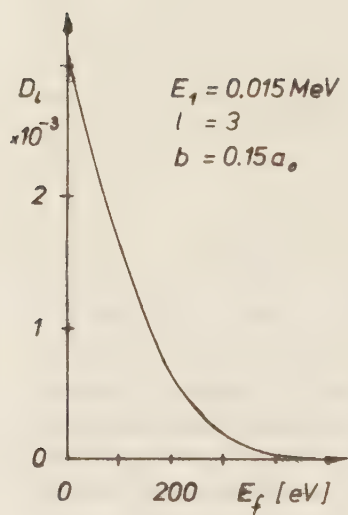


Abb. 18:  $D_l(E_f; 42; b)$

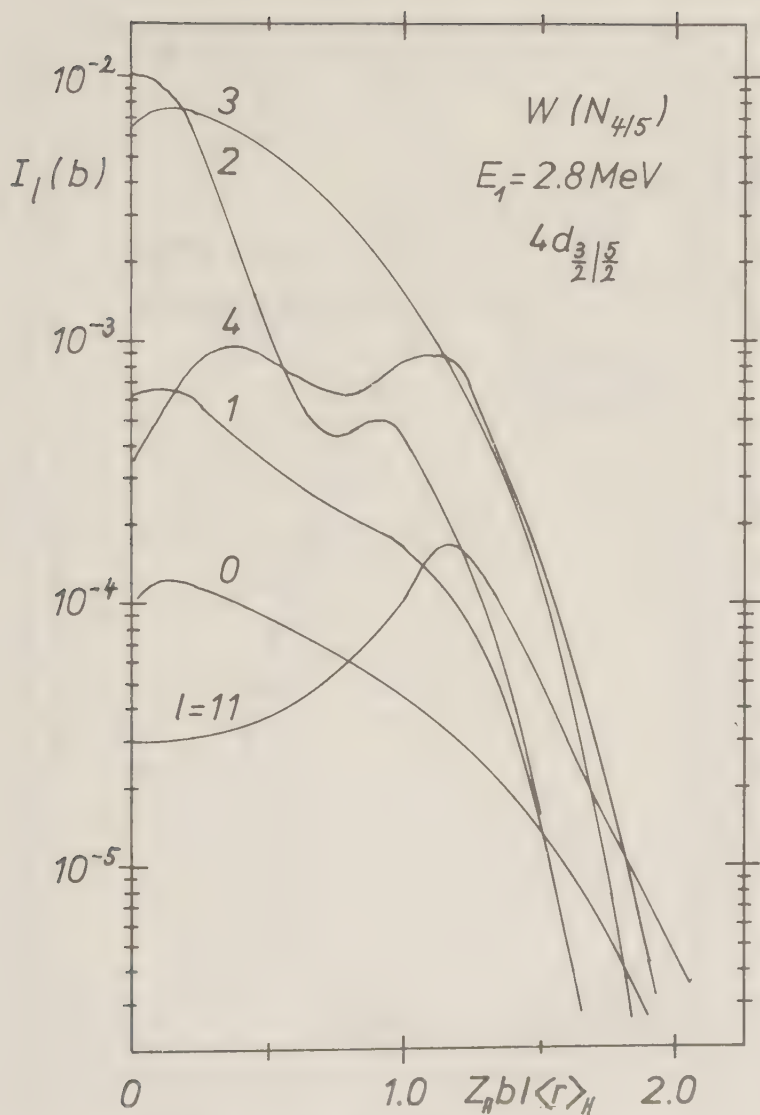


Abb. 19: Ionisierungswahrscheinlichkeit (Multipole)

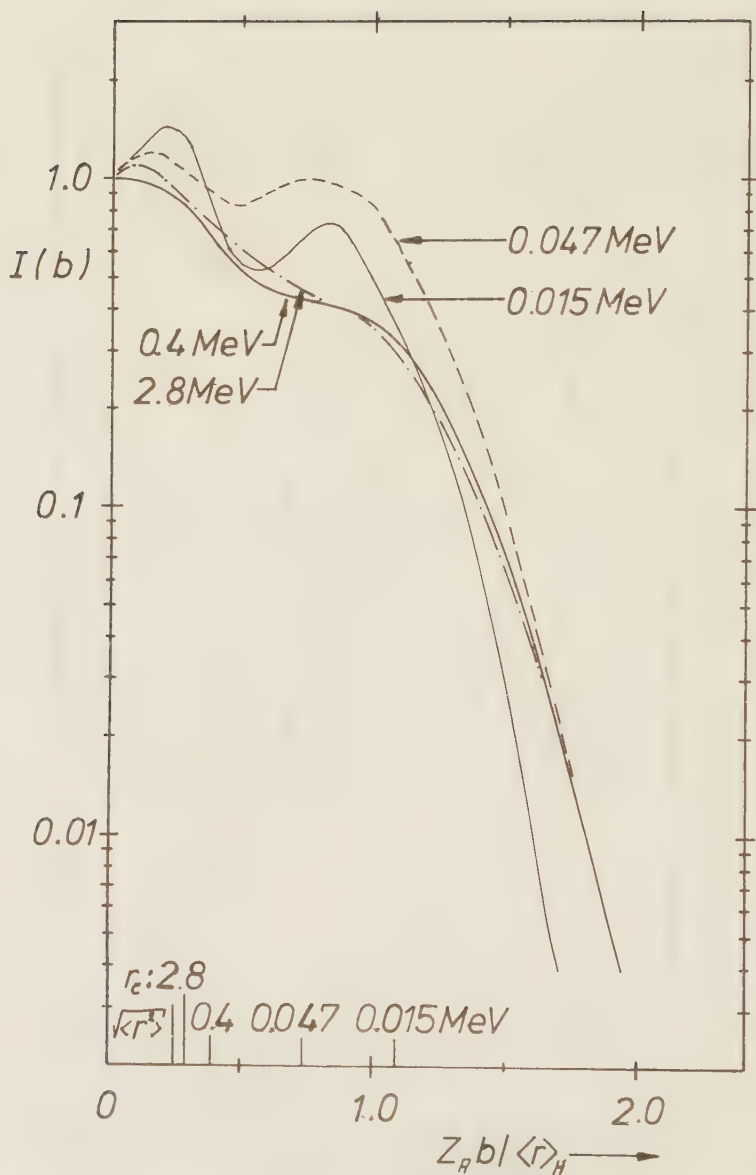


Abb. 20: Ionisierungswahrscheinlichkeit

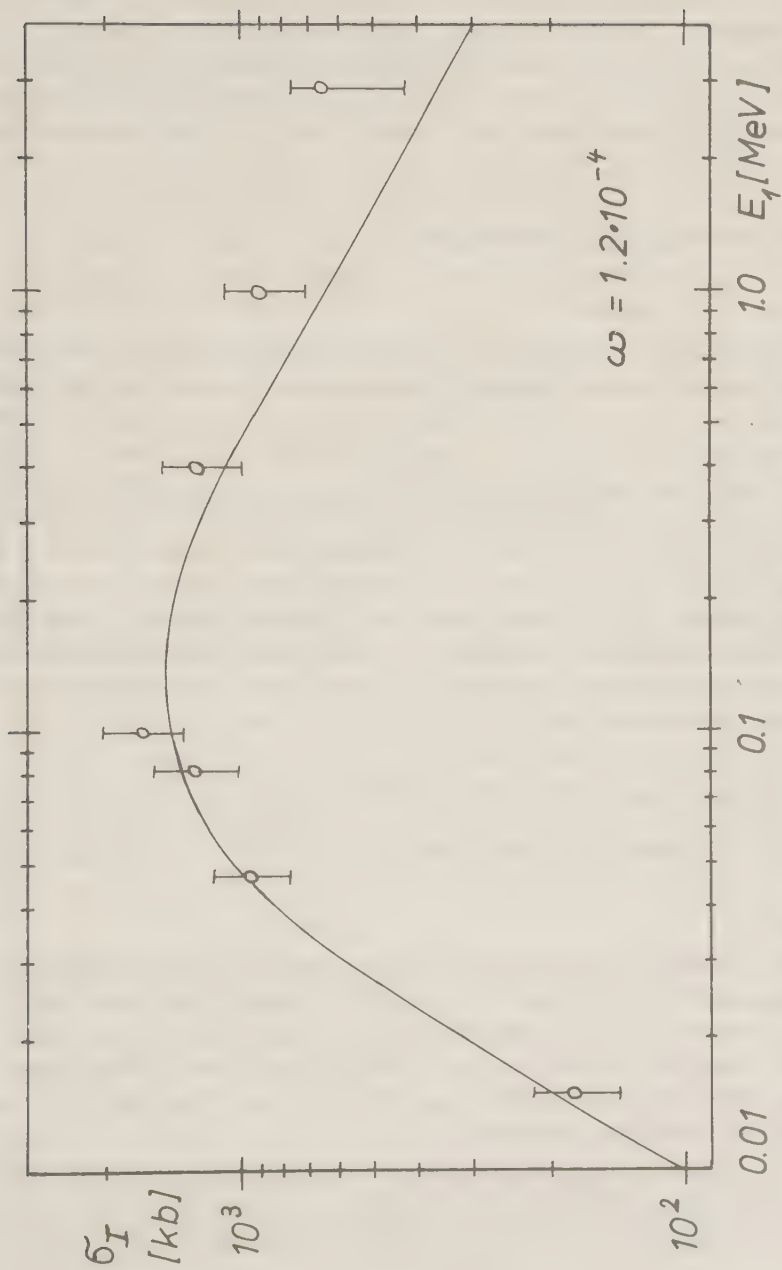


Abb. 21: totaler Ionisations-Wirkungsquerschnitt

schiedenen Energien aufgetragen. Ferner sind noch die minimale Annäherung  $r_c$  /53/ eines geführten Protonstrahls an eine  $\langle 111 \rangle$  - Richtung in Wolfram, sowie die mittlere thermische Schwingungsamplitude  $\langle r^2 \rangle^{1/2} = (2/3 \langle R^2 \rangle)^{1/2}$  /35/ für  $T = 300$  K (siehe weiter unten) angegeben. Abb. 21 zeigt den totalen Wirkungsquerschnitt.

#### 5.1.4 Gitterführung ("Channeling")

Zusammenfassende Darstellungen des Gitterführungseffektes sind in /35, 54 - 57/ gegeben.

Bei Einschuß in eine niedrigindizierte Richtung (bzw. Ebene) erfolgt eine Reihe korrelierter Kleinwinkelstreuungen an den Atomen des Kristalls derart, daß die Bahnkurve des Projektils in guter Näherung durch Streuung an einem Zylinderpotential (bzw. planarem Potential), das man durch Ausschmieren des Atompotentials entlang einer Atomkette (-ebene) erhält, beschrieben werden kann. Diese Näherung ist nur gültig für hinreichend kleine Einschußwinkel in Bezug auf die niedrigindizierte Richtung (Ebene). Werden diese Winkel größer als ein bestimmter kritischer Winkel  $\psi_c$ , dann geht die Streukorrelation verloren und die Streuung erfolgt annähernd wie die in einer amorphen Substanz. Abschätzungen zeigen, daß für axiales Channeling /35/

$$\psi_c^{ax} = \begin{cases} \alpha_R \cdot \psi_1 \equiv \alpha_R \cdot [2Z_1 Z_2 e^2 / (d E_1)]^{1/2} & \text{für } E_1 > E' \\ \alpha_R \cdot \psi_2 \equiv \alpha_R \cdot [\sqrt{3}/2 a_{TF} \psi_1 / d]^{1/2} & E_1 < E' \end{cases} \quad (22)$$

wobei  $\alpha_R = 0,5 \dots 2$  und  $E' = 2Z_1 Z_2 e^2 d / a_{TF}^2$ .

Durch diese Kleinwinkelstreuung am Zylinderpotential werden kleine Stoßparameter unterdrückt und große bevorzugt. Dies führt u.a. zu einer Umverteilung des Projektilflusses: Erhöhung in der Kanalmitte, Erniedrigung an den Atomen des Wirtsgitters. Ferner hat diese Stoßparameters Selektion noch Einfluß auf elastische und inelastische Wechselwirkungen.

Eine analytische Behandlung dieses Flußverteilungsproblems ist möglich, wenn die Streuung im 4-dimensionalen Phasenraum der Ebene senkrecht zu den Atomketten der statistischen Mechanik gehorcht.

Dafür muß eine Gleichverteilung des Azimuthimpulses erreicht werden. Dies ist nach  $\lambda_{\perp} = [\pi^2 N_{2d} a_{TF} \psi_1^2 / (4\psi)]^{-1}$  der Fall. Für 2,8 MeV (0,4 MeV) Protonen, die sich in der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung in Wolfram bewegen, und einem  $\psi = \psi_1 = 0,96^\circ$  erhält man eine mittlere freie Weglänge  $\lambda_{\perp}$  von 125 nm (47 nm). Die mittlere Tiefe, aus der 50 % der Wolfram-(K)-Strahlung kommt, beträgt etwa 25 nm. Damit ist eine analytische Behandlung des Problems ausgeschlossen. Es muß daher eine Monte-Carlo-Simulation /38/ durchgeführt werden.

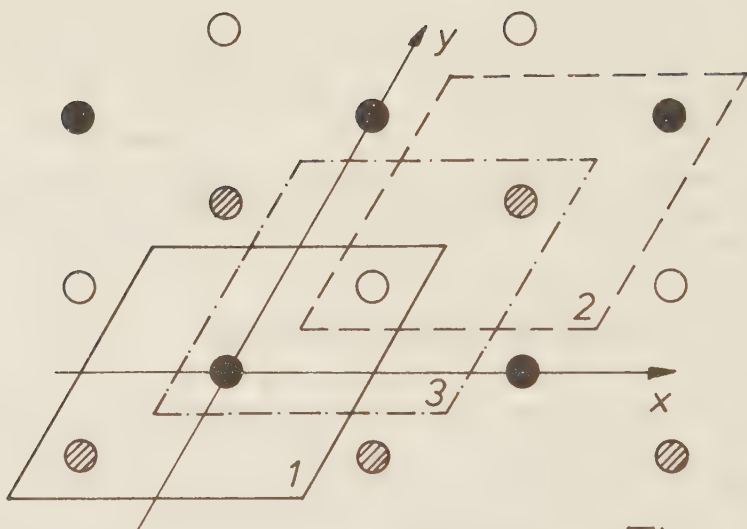
### 5.1.5 Monte-Carlo-Simulation

Die Ausbeute  $Y$  an charakteristischer Röntgenstrahlung beim Beschuß des Wolframkristalls mit Protonen der Energie  $E_1$  ist gegeben durch /59/

$$Y(E_1, \psi) \propto \int W(E, \vec{r}) I(E, |\vec{r} - \vec{r}'|) f(\vec{r}') g(\vec{r}') d\vec{r}' dE d\Omega \quad (23)$$

$W(E, \vec{r})$  ist die Zahl der Protonen im Volumenelement  $d\vec{r}$  an der Stelle  $\vec{r}$  und im Energieintervall  $(E, E+dE)$ .  $I(E, |\vec{r} - \vec{r}'|)$  ist die Ionisationswahrscheinlichkeit für ein Wolframatom durch ein Proton der Energie  $E$  im Abstand  $|\vec{r} - \vec{r}'|$ .  $f(\vec{r}')$  beschreibt die thermische Bewegung der Gitteratome.  $g(\vec{r}')$  berücksichtigt die Absorption der Röntgenstrahlung im Kristall. Dieses Integral kann analytisch nicht ausgewertet werden, da für den vorliegenden Fall nicht einmal die Flußverteilung  $W$  und die Ionisationswahrscheinlichkeit  $I$  analytisch darstellbar sind. Für die Monte-Carlo-Simulation wurde ein von H.-D. Carstanjen /60/ in FORTRAN geschriebenes Programm modifiziert.

Ein Protonenstrahl mit den Energien 0,015 MeV, 0,047 MeV, 0,400 MeV und 2,200 MeV fällt in die  $\langle 111 \rangle$ -Richtung eines Wolframkristalls ( $T = 300$  K) unter  $16^\circ$  zu einer (110)-Ebene ein. Das kubisch raumzentrierte Gitter des Wolframs wird so in Einheitszellen aufgeteilt (Abb. 22), daß sich in der Mitte jeder Zelle genau 1 Atom befindet. Dieses Atom führt thermische Schwingungen aus. Auf die Einheitszelle werden nun gleichmäßig verteilt Protonen mit der Energie  $E_1$  und dem Impuls  $\vec{p}$  ( $|\vec{p}| = \sqrt{2M_1 E_1}$ ) geschossen. Die Protonen bewegen sich mit maximal 7,7 % der Lichtgeschwindigkeit, also nicht relativistisch. Die Strahldivergenz wird durch eine Gaußverteilung berücksichtigt.



Ebenenabstand:  $a\sqrt{3}/6$

Abb. 22: Streuzelle (Projektion auf (111))

Beim Eintritt in die i-te Zelle werden Impuls  $\vec{p}_i$  und Ort  $\vec{r}_i$  des Teilchens registriert. Hieraus läßt sich die Flußverteilung W ableiten. Aus dem Abstand vom Atom wird die Ionisationswahrscheinlichkeit berechnet. Die Abschwächung, die die Röntgenstrahlung auf dem Weg zum Detektor erfährt, wird durch den Faktor  $\exp[-\mu z/\cos(\delta - \psi)]$  berücksichtigt; wobei  $\mu$  der Absorptionskoeffizient und  $\delta$  der Winkel zwischen Detektor und Strahlrichtung ist.

Die durch die Streuung sich ergebenden neuen Größen  $\vec{p}_{i+1} = \vec{p}_i + \Delta\vec{p}_i$  und  $\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_i + \Delta\vec{r}_i$  sind gleichzeitig die neuen Eingabegrößen für die Zelle i+1. Teilchen, die aus dem geführten Strahl ausscheiden, tragen pro Zelle zur "Ionisationsausbeute" mit  $N_2 \sigma_I \Delta z \exp[-\mu z/\cos(\delta - \psi)]$  bei. Es werden jeweils alle Teilchen von Zelle zu Zelle verfolgt. Dadurch kann die Röntgenausbeute in Abhängigkeit von der Tiefe angegeben werden. Die Rechnung wird über 900 Zellen ausgeführt. Dann ist die Röntgenausbeute für Protonen, die unter einem gegenüber dem kritischen Winkel großen Winkel einfallen, auf einige Prozent in Bezug auf die Oberfläche abgefallen. Aus statistischen Gründen wird i.a. jeweils über zehn Streueinheiten aufsummiert.

Die Ausgabegrößen sind: Röntgenausbeute der geführten und dechannelten Teilchen in Abhängigkeit von der Eindringtiefe, die gesamte Röntgenausbeute, die Flußverteilung in der Zelle als Funktion der Tiefe, die Ein- und Ausgangsgrößen des Ortes und Impulses der Teilchen, sowie die Angabe, welche Teilchen noch geführt sind. Die Flußverteilung ist dabei auf die Gleichverteilung normiert.

Im folgenden wird auf Einzelheiten des Programms näher eingegangen:

Zelleneinteilung (Abb. 22). Die Elementarzelle der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung wird von einer  $60^\circ$ -Raute mit den Seitenlängen  $a\sqrt{2}$  und der Tiefe  $a\sqrt{3}/6$  gebildet. Drei aufeinanderfolgende Ebenen bilden eine Streueinheit. Die Oberfläche einer Elementarzelle wird in  $24 \times 24$  bzw.  $72 \times 72$  ähnliche Rauten aufgeteilt. Die Protonen starten mit gleicher Energie von der Mitte dieser Felder der ersten Streuebene; die Anzahl der Projektile ist also gleich der Zahl der Felder. Die Winkelverteilung des einfallenden Protonenstrahls wird durch einen Zufallsgenerator mit gaußverteilten Zufallszahlen erzeugt. Es wurden Halbwertsbreiten von  $1,0^\circ$ ,  $0,114^\circ$  und  $0,5^\circ$  für  $E_1 = 0,015$  MeV,  $0,047$  MeV und  $0,4$  (2.8) MeV gewählt.

Streuung an Targetatomen. Ein Proton bewegt sich auf einer Geraden auf ein Wolframatom zu und wird am Ort geringster Annäherung gestreut. Die Streuung wird hierbei als reines Zweikörperproblem behandelt. Das Proton fliegt nun längs des Asymptote auf das nächste Atom zu und wird wieder beim kleinsten Abstand gestreut. Die Bahnkurve des Projektils besteht also aus einer Aneinanderreihung gerader Stücke, deren Knicke in den Streuebenen liegen. Die Rechtfertigung hierfür wird weiter unten gegeben.

Zunächst soll jedoch auf die Streuung eines einzelnen, nicht-relativistischen Protons (Masse  $M_1$ ) an einem einzelnen Atom (Masse  $M_2$ ) eingegangen werden. Für  $M_1 \ll M_2$  gilt für den Streuwinkel  $\vartheta$  im Laborsystem /61/:

$$\vartheta = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} dr br^{-2} [1 - V(r)/E_1 - b^2/r^2]^{-1/2} \quad (24)$$

$V(r)$  ist das Wechselwirkungspotential und  $r_m$  der Abstand geringster Annäherung. Die Entwicklung des Integrals mit der Methode komplexer Integrale liefert /62/:

$$\begin{aligned} \vartheta &= \sum_{n=1}^{\infty} \vartheta_n \\ \vartheta_n &= \frac{-2b}{2^n n! E_1^n} \int_b^{\infty} \frac{dr}{(r^2 - b^2)^{1/2}} \left\{ \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \right\}^n V^n(r) r^{2n-1} \end{aligned} \quad (25)$$

Der erste Term dieser Entwicklung wird Impulsnäherung genannt. Als Streupotential wird die Molièresche Näherung des Thomas-Fermi-Potentials benützt /63/:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a_{TF}} \frac{1}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp(-\beta_i r/a_{TF}) \quad (26)$$

mit  $\alpha_i = \{0.10, 0.55, 0.35\}$   $\beta_i = \{6.0, 1.2, 0.3\}$

$a_{TF}$  ist der Thomas-Fermi-Abschirmradius in der von Firsov /64/ angegebenen Version: für nackte Projektile gilt  $a_{TF} = 0,8853 \cdot a_0 Z_2^{-1/3}$ , wobei  $a_0 = 52,9$  pm der Bohrsche Radius ist. Unter Berücksichtigung der Molièreschen Näherung findet man die ersten drei Glieder der Entwicklung:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1 &= \varepsilon_E^{-1} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i K_1(\beta_i b/a_{TF}) \\ \mathcal{J}_2 &= \varepsilon_E^{-2} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i^2 K_1(2\beta_i b/a_{TF}) \\ \mathcal{J}_3 &= \frac{9}{8} \varepsilon_E^{-3} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i^3 [K_1(3\beta_i b/a_{TF}) - (a_{TF}/3\beta_i b) K_0(3\beta_i b/a_{TF}) - \\ &\quad - (a_{TF}/3\beta_i b)^2 K_1(3\beta_i b/a_{TF})] \end{aligned} \quad (27)$$

$\varepsilon_E^{-1} = Z_1 Z_2 e^2 / E a_{TF}$  und  $K_0, K_1$  sind modifizierte Besselfunktionen /65/.

Nach /66/ ist die Größe  $\gamma = (\mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3) / \mathcal{J}_1$  ein Maß für die Genauigkeit der Impulsnäherung: Man kann ein  $\mathcal{J}_1$  als Funktion von  $\varepsilon_E$  finden, so daß es sich von  $\mathcal{J}$  nicht mehr als um  $(1/\gamma - 100)$  Prozent unterscheidet. Jedes kleinere  $\mathcal{J}_1$  bei gegebener Relativenergie  $\varepsilon_E$  ist genauer. Die  $\gamma = 0,90, 0,99$  und  $0,999$  entsprechenden Kurven sind in Abb. 23a für den Zusammenhang Streuwinkel - Relativenergie und in Abb. 23b für die Relation Stoßparameter - Relativenergie aufgetragen. (In /66/ wurden die Verhältnisse nur für das Bohr- bzw. das reine Coulomb-Potential berücksichtigt.) In beiden Abbildungen wurde ebenfalls die quantenmechanische Grenze eingetragen.

Für eine klassische Behandlung der Streuung erfolgt eine Abgrenzung nach großen Stoßparametern (kleinen Streuwinkeln) hin durch die Beziehung /62/:

$$2r_m(b) \sin(\mathcal{J}/2) / \chi \gg 1 \quad (28)$$

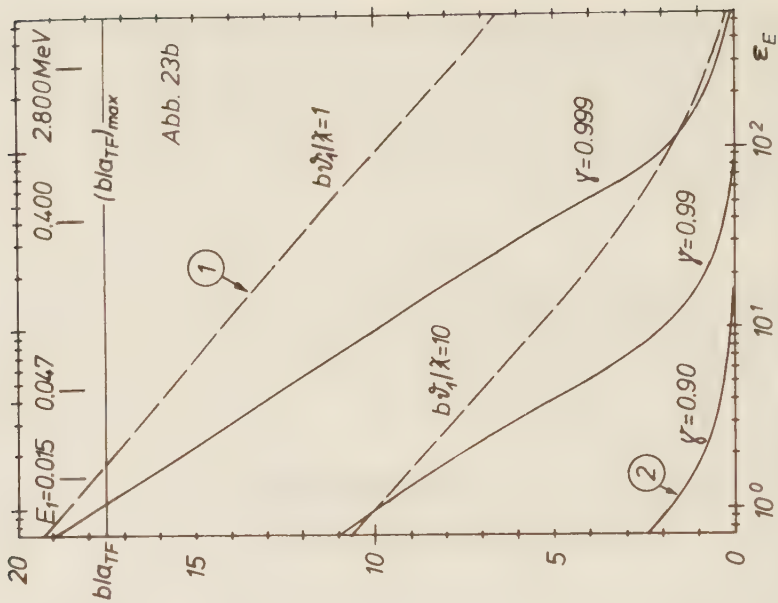
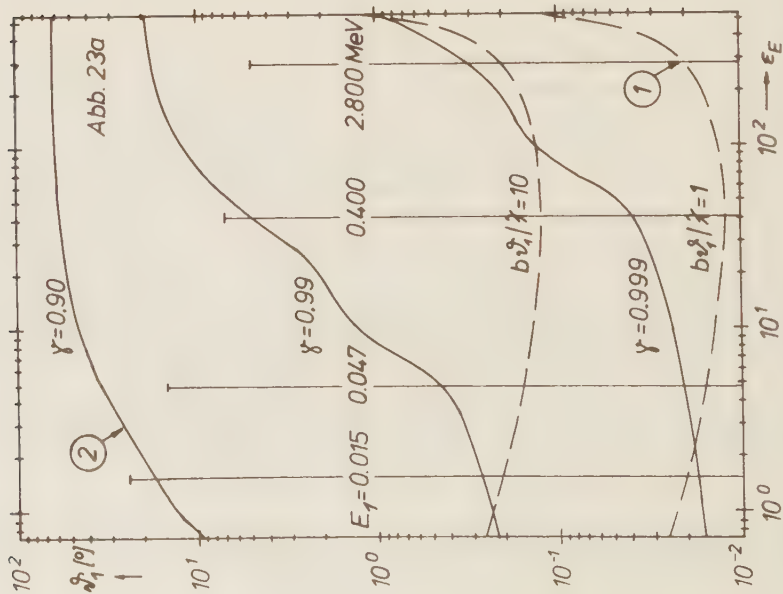


Abb. 23 Genauigkeit der Impulsnäherung und quantenmechanische Einschränkung

$\lambda$  ist die reduzierte Wellenlänge im Schwerpunktsystem. Für kleine Streuwinkel reduziert sich die Ungleichung auf

$$b_0/\lambda \gg 1 \quad (28a)$$

Unterhalb (oberhalb) der Kurve ① in der Abb. 23b (Abb. 23a) bewegen wir uns im klassischen Bereich; oberhalb (unterhalb) Kurve ② ist die Impulsapproximation genauer als 10 Prozent. Eingetragen sind ebenfalls der Winkelbereich der bei den Rechnungen durchlaufen wird, sowie der maximale Stoßparameter. Die Impulsnäherung ist also, vielleicht die 0,015 MeV ausgenommen, stets eine gute Näherung.

Jetzt kann auf die eingangs gestellte Forderung des reinen Zweikörper-Stoßes näher eingegangen werden:

- (i) Die Reichweite des abgeschirmten Coulomb-Potentials ist, bezogen auf den Abstand zum nächsten Nachbarn in einer Streuebene, sehr klein. Dadurch wechselwirkt das Projektil nur mit einem einzigen Targetatom.
- (ii) Der Fehler, der durch die Integration von  $-\infty$  bis  $+\infty$  bei der Berechnung des Streuwinkels auftritt, kann infolge des stark abfallenden Potentials vernachlässigt werden.
- (iii) Abschätzungen nach /67/ ergeben, daß Änderungen des Streuwinkels auf Grund der Rückstoßbewegung des streuenden Atoms vernachlässigt werden können, ferner, daß die Benutzung der asymptotischen Bahnen eine gute Näherung der wahren Trajektorie darstellt.

Die Gitteratome führen thermische Schwingungen um ihre Gleichgewichtslage aus. Die Wahrscheinlichkeit für eine Auslenkung in die x,y oder z-Richtung soll einer Gaußverteilung gehorchen:

$$P(u_i) = (2\pi u_i^2)^{-1/2} \exp(-u_i^2/2u_i^2) \quad (29)$$

wobei  $u_i = x, y$  oder  $z$  und  $u_i^2 = \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$ . Den Wert für  $u_i^2$  hat Glauber /68/ aus dem Debye-Modell hergeleitet:

$$u_i^2 = (3\hbar^2/M_2 k_B T_D) [1/4 + (T/T_D) \Phi(T_D/T)] \quad (30)$$

$k_B$  ist die Boltzmannkonstante,  $T_D$  die Debye-Temperatur (für Wolfram  $T_D = 310$  K /39, 69/ und  $\Phi(x) = x^{-1} \int_0^x t dt / (e^t - 1)$  die Debye-Funktion /65/. Für  $T = 300$  K ergibt sich  $u_1 = 5,05$  pm. Die Schwingung in der Bewegungsrichtung der Projektile (z-Richtung) braucht nicht berücksichtigt zu werden, da  $u_1 \ll d$  (Abstand zur nächsten Streuebene,  $d = 91$  pm) ist. Korrelationen der Schwingungen benachbarter Gitteratome können vernachlässigt werden /59/.

Im Rechenprogramm wird zur Berechnung des Streuwinkels stets die Impulsnäherung verwendet. Benutzt man die in /66/ angegebene Näherung, so kann die Rechenzeit um bis zu neunzig Prozent gekürzt werden, wobei es Abweichungen um ungünstigstenfalls von drei Prozent geben kann.

$$\mathcal{S}_1 = \epsilon_E^{-1} \cdot \begin{cases} 101x^{-1} \exp(-0.5x) & \text{für } x \leq 1.5 \\ (0.03|x-3.8| + 0.64)x^{-1} \exp(-0.3x) & 1.5 < x \leq 30 \end{cases} \quad (31)$$

$$x = b/a_{TF}$$

Berücksichtigt man noch die Geometrie des schiefwinkligen Koordinatensystems und das Auftreten kleiner Winkel, so lassen sich die Orts- und Impulskoordinaten der Projektile beim Übergang von der Zelle  $i$  in die Zelle  $i+1$  wie folgt schreiben (falls man nur die Streuung an den Gitteratomen berücksichtigt):

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + (p_{i+1}^x/p) d_E & p_{i+1}^x &= p_i^x + \mathcal{S}_1 p \Delta x / s_H \\ y_{i+1} &= y_i + (p_{i+1}^y/p) d_E & p_{i+1}^y &= p_i^y + \mathcal{S}_1 p \Delta y / s_H \end{aligned} \quad (32)$$

$$\text{wobei } p = (2M_1 E_1)^{1/2}, \quad d_E = a\sqrt{3}/6$$

$$\Delta x = x_i - x_{th} + y_{th}/\sqrt{3}, \quad \Delta y = y_i - 2y_{th}/\sqrt{3}$$

$$s_H = [(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + \Delta x \cdot \Delta y]^{1/2}$$

Die thermischen Auslenkungen  $x_{th}$  und  $y_{th}$  werden durch einen Zufalls-generator mit gaußverteilten Zahlen erzeugt.

Als Kriterium dafür, ob ein Teilchen sich noch im geführten Strahl befinden soll oder nicht, gilt das Unterschreiten eines Stoßparameters von  $0,025 a_{TF}$  oder das Überschreiten eines Streuwinkels, der etwa dem im Rückstreuexperiment gefundenen "Random-Winkel" entspricht.

Röntgenanregung. Die Werte für die Ionisationswahrscheinlichkeit wurden den vorher ausgeführten Rechnungen (Abschnitt 5.1.3) entnommen. Sie wurden in einem  $0,1 b/a_0$ -Raster ins Programm eingegeben. Zwischenwerte wurden durch lineare Interpolation erhalten. Der für ein nicht mehr geführtes Teilchen angenommene Beitrag von  $N_2 \sigma \Delta z \cdot \exp[-\mu z / \cos(\delta - \psi)]$  wird über die Tiefe hinweg aufsummiert. Für den Absorptionskoeffizienten wurde ein experimenteller Wert /70/ von  $\mu = 3,6 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$  genommen; da für diese weiche Strahlung keine scharfen Absorptionskanten existieren, ist eine genaue Kenntnis der Energie der Wolfram-(N)-Linie nicht nötig. Nur bei der Protonenenergie von  $0,015 \text{ MeV}$  wurde ein  $\mu_{eff} = 5,73 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$  eingesetzt. Der Grund hierfür wird weiter unten erläutert.

In der hier verwendeten Form der SCA-Theorie werden nur gerade Projektilbahnen betrachtet. Die Ablenkung im Coulombfeld kann in etwa dadurch berücksichtigt werden, daß man statt des Stoßparameters die minimale Annäherung zur Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeit verwendet /50/. Rechnungen zeigen, daß dieser Einfluß nur  $0,015 \text{ MeV}$  zu berücksichtigen ist: der totale Wirkungsquerschnitt wird um etwa 6 % kleiner.

Energieverlust. Bewegen sich Ionen durch einen Festkörper, so verlieren sie ihre Energie in erster Linie durch eine Folge von elastischen und inelastischen Coulomb-Wechselwirkungen. Bei höheren Energien /71/ überwiegt der Verlust durch Wechselwirkung mit den Elektronen (elektronischer Energieverlust  $(dE/dz)_e$ ) gegenüber denjenigen durch elastische Stöße mit Kristallatomen (nuklearer Energieverlust  $(dE/dz)_n$ ). Aus dem Energieverlust lassen sich projizierte Reichweite  $R_p$  und Reichweitenstreuung  $\Delta R_p$  berechnen /71/. Zur Abschätzung der Bedeutung des Energieverlustes für die Monte-Carlo-Simulation wurden die nach /71/ gerechneten und in /72/ tabellierten

Werte für den Fall von Protonen in amorphem Gold ( $Z_2 = 79$ ,  $M_2 = 197$ ,  $\hbar\omega(\text{Plasmon}) = 25,8 \text{ eV} / 98/$ ) verwendet. Diese Werte dürften sich für Wolfram ( $Z_2 = 74$ ,  $M_2 = 184$ ,  $\hbar\omega(\text{Plasmon}) = 24,3 \text{ eV} / 73/$ ) als Targetmaterial nur geringfügig ändern /74/.

Tabelle 6:  $H^+ \rightarrow Au$  /72/ (Werte gerundet)

|              |       |       |       |       |                    |
|--------------|-------|-------|-------|-------|--------------------|
| $E_1$        | 0,010 | 0,050 | 0,400 | 1,000 | MeV                |
| $(dE/dz)_n$  | 1,65  | 0,87  | 0,22  | 0,10  | keV/ $\mu\text{m}$ |
| $(dE/dz)_e$  | 68    | 143   | 171   | 97    | keV/ $\mu\text{m}$ |
| $R_p$        | 43    | 221   | 1800  | 6243  | nm                 |
| $\Delta R_p$ | 47    | 120   | 331   | 703   | nm                 |

Vergleicht man die projizierte Reichweite mit der Tiefe, aus der etwa 90 % der Wolfram-(N)-Strahlung kommt ( $\approx 80 \text{ nm}$ ), so dürfte es gerechtfertigt sein, für Energien  $\lesssim 0,050 \text{ MeV}$  den Energieverlust zu vernachlässigen. Da die Ionisationswahrscheinlichkeit  $I(b)$  nur für vier Energien gerechnet werden konnte und eine Interpolation hier nicht möglich ist, wurde ein effektiver Absorptionskoeffizient  $\mu_{\text{eff}} = \alpha \cos \vartheta + \mu$  eingeführt. Dies gilt unter der Voraussetzung, daß die Form der Ionisierungswahrscheinlichkeit energieunabhängig ist und der totale Wirkungsquerschnitt einen exponentiellen Verlauf  $\sigma = \sigma_0 \exp[-\alpha(E_0 - E)/(dE/dz)]$  zeigt.

Streuung an Elektronen. Durch die Streuung an den Elektronen wird der Streuwinkel  $\vartheta$  beeinflusst. Nach van Vliet /75/ gilt in erster Näherung

$$\Delta \vartheta \approx \Delta p/p \approx \left( \frac{m_e}{M_1} \frac{\Delta E_{\text{inel}}}{E_1} \right)^{1/2} \quad (33)$$

$m_e$  ist die Elektronenmasse und  $\Delta E_{\text{inel}}$  der durchschnittliche inelastische Verlust pro Stoß in engen Stößen:

$$\Delta E_{\text{inel}} \approx \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{dE}{dz} \right)_e \Delta z \quad (33a)$$

Für 0,015 MeV (0,4 MeV) ergeben sich damit Streuwinkel von nur  $0,02^\circ$  ( $0,007^\circ$ ). Sie wurden daher vernachlässigt. Ebenso blieben Aufstreuung und Energieverlust durch Oberflächenverunreinigungen und durch Fehlstellen im Inneren des Kristalls unberücksichtigt.

Test des Rechenprogramms. Zur Kontrolle des Programms auf Programmierfehler wurden einige Projektilen per "Hand-Rechnung" über einige Streuebenen hin verfolgt. Der Test wurde mit und ohne thermische Schwingungen und Strahldivergenz durchgeführt. Für große Einschuwinkel ( $\psi > \psi_c$ ) muß sowohl die totale Röntgenausbeute gleich der totalen "Random"-Ausbeute  $N_1 N_2 \sigma \cos(\delta - \psi) / \mu$  sein, als auch der Beitrag zur Röntgenausbeute aus der Tiefe ( $z, z + \Delta z$ ) gleich dem Randomwert  $N_1 N_2 \sigma \int_z^{z+\Delta z} \exp(-\mu z' / \cos(\delta - \psi)) dz'$  sein. Die beiden letzten Bedingungen sind besser als ein Prozent erfüllt.

Da im Rechenprogramm nur eine endliche Zahl von Teilchen eingeschossen werden kann, wurde die Statistik dadurch kontrolliert, daß für den Einschuß unter einem großen Winkel und für  $\psi = 0^\circ$  die Teilchenzahl von 576 ( $24 \times 24$ -Raster) auf 5184 ( $72 \times 72$ -Raster) erhöht wurde. Die Abweichungen liegen im Promille-Bereich.

Rechenergebnisse. In Abb. 24 ist die Winkelabhängigkeit der Röntgenausbeute für die vier gerechneten Energien aufgetragen. Die Kurven sind bereits normiert und für die Absorption korrigiert worden. Man sieht deutlich, daß mit abnehmender Energie die Schultern flacher und die Kurven breiter werden, die relative Ausbeute in der Gitterrichtung abnimmt und bei 0,015 MeV wieder ansteigt. Der Vergleich mit theoretischen Werten für Rutherford-Rückstreuung findet sich im folgenden Abschnitt.

Eine weitere Analyse der Ergebnisse wird für  $E_1 = 2,8$  MeV dargestellt. Die Tiefenabhängigkeit der Röntgenausbeute für einen Einschuß parallel zur  $\langle 111 \rangle$ -Richtung und einen Random-Einschuß zeigt Abb. 25. Bei dem geführten Strahl kommen 88 % der Röntgenstrahlung aus etwa 110 nm Tiefe. Für den Random-Fall wurde noch die Kurve für einen amorphen Kristall (siehe Kapitel "Test des Rechenprogramms") eingezeichnet. Die Minima entstehen durch Minima der Flußverteilung in der Nähe der Gitteratome.

Die Flußverteilung in der Kanalmitte als Funktion der Tiefe für den Einschuwinkel  $\psi = 0^\circ$  kann Abb. 26 entnommen werden. Hieraus läßt

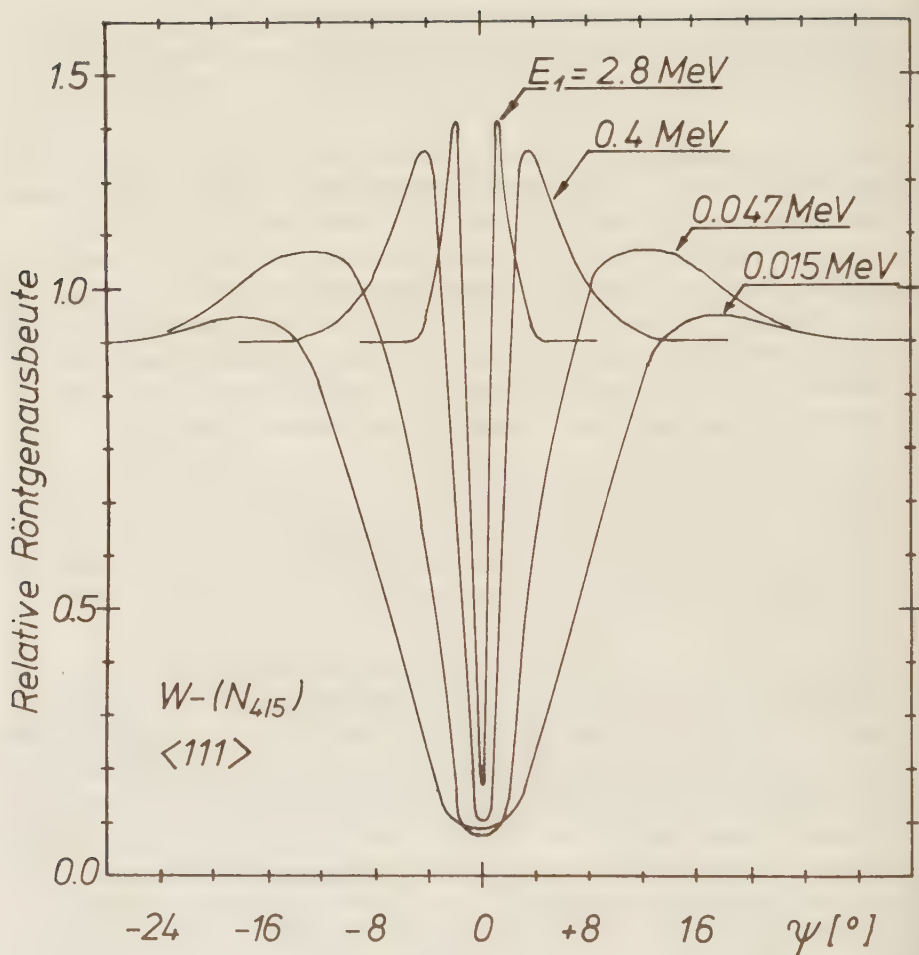


Abb. 24: theoretische Ausbeutekurven

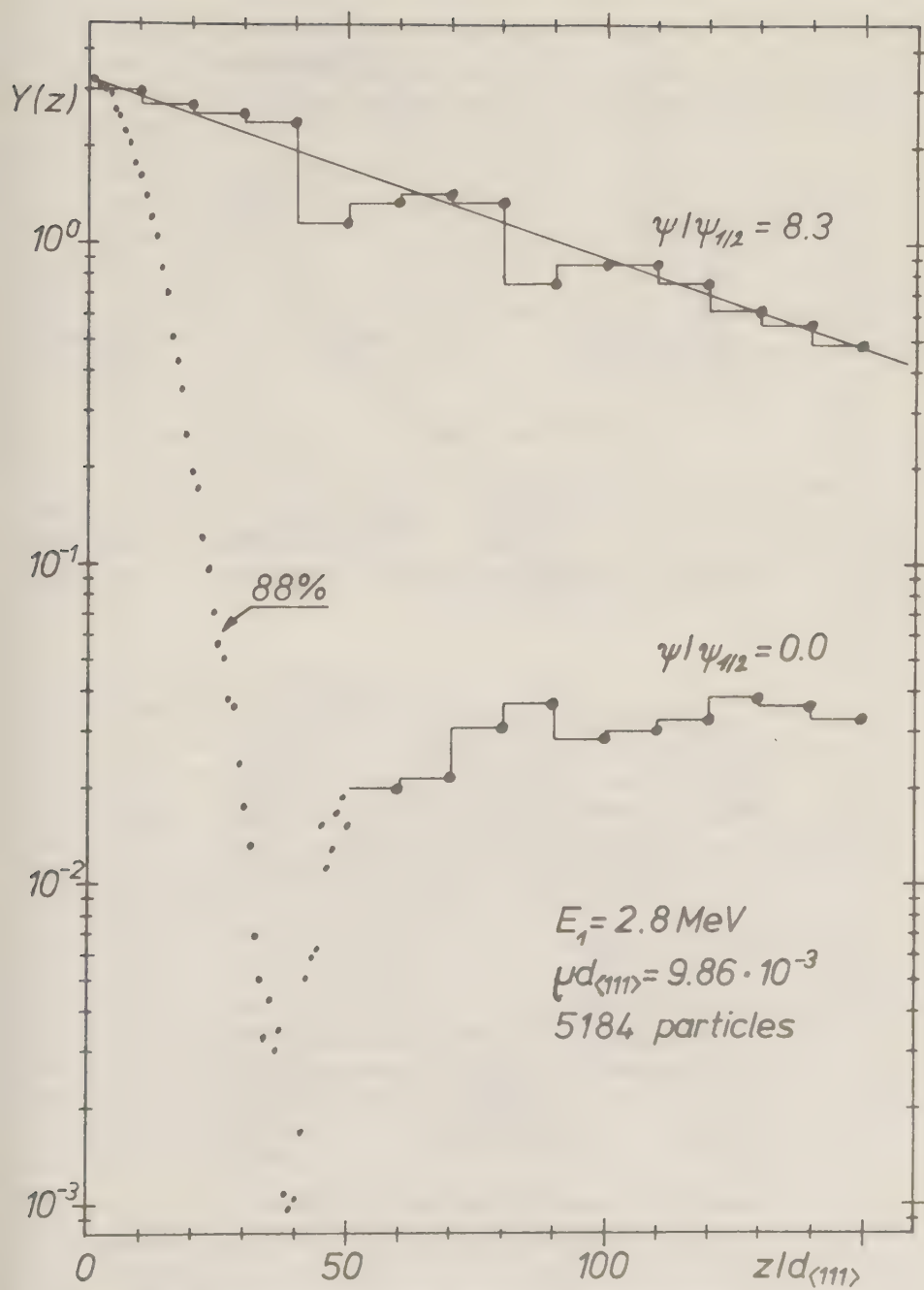


Abb. 25: Tiefenabhängigkeit der Röntgenausbeute

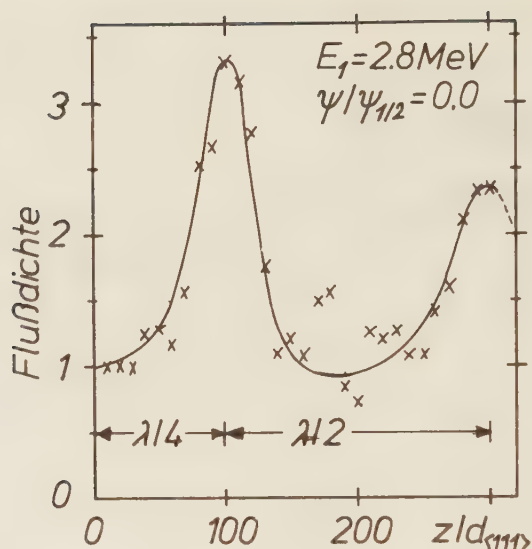


Abb. 26: Flußdichteverteilung in der Kanalmitte ( $\langle 111 \rangle$ )

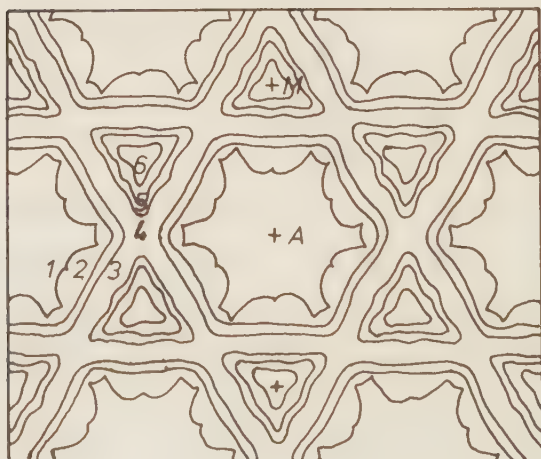


Abb. 27: Linien konstanter Flußdichte  
(300 keV  $D^+$  in Nb  $\langle 111 \rangle$  1591)

sich eine mittlere Wellenlänge für die Oszillationen der geführten Teilchen um die Kanalmitte angeben. Das erste Maximum ist  $\lambda/4$  von der Oberfläche entfernt; hiermit wird  $\lambda \approx 110$  nm.

Qualitative Auskunft über die Verteilung der Flußdichte in der (x,y)-Querebene gibt Abb. 27. Sie wurde von Carstanjen /59/ gerechnet: Dargestellt sind die 25 % (1), 50 % (2), 75 % (3), 125 % (4), 200 % (5) und 300 % (6) Konturenlinien in einer Tiefe von 10 nm bei einer Temperatur von 150 K. Man erkennt deutlich die sechszählige Symmetrie um die Atomreihen A und die dreizählige Symmetrie um die Kanalmitte M.

### 5.1.6 Vergleich mit den Meßergebnissen

In den Abbildungen 28a bis 28f sind die Meßergebnisse zusammengefaßt. Die Kurven wurden auf den "Random"-Wert normiert. Bei den Röntgenkurven wurde außerdem die Absorption berücksichtigt. Ferner sind noch die gerechneten Kurven für die Wolfram-(N)-Linie eingetragen.

Rutherford-Rückstreuung (RBS). Die Minimalausbeute  $\chi_{\min}$  und der kritische Winkel  $\psi_c$  sind Kenngrößen der Gitterführung /35, 54 - 57/. Ein Maß für den kritischen Winkel ist der Winkel  $\psi_{1/2} = C \psi_c$  ( $C \approx 1-2$ ), der an der Stelle gemessen wird, an der die Ausbeute  $Y = (Y_{\text{random}} + Y_{\min})/2$  ist /35/.  $\psi_{1/2}$  bzw.  $\psi_c$  wurde von verschiedenen Autoren /53, 54, 76/ berechnet. Abb. 29 gibt einen Vergleich der vorliegenden Meßergebnisse mit den theoretisch ermittelten. Für Protonenenergien größer gleich 0,4 MeV folgen die Meßpunkte der von Barrett /76/ angegebenen Energieabhängigkeit. Die Messungen von 0,047 MeV bis 0,100 MeV werden durch  $\psi_2$  von Lindhard /54/ gut wiedergegeben. Die starke Abweichung bei 0,015 MeV dürfte durch die bei dieser Energie sehr schlechten Auflösung von 50 % und der absoluten Energienachweisgrenze von minimal etwa 10 keV des Halbleiterdetektors bedingt sein. Die Werte bei 0,030 MeV und 0,078 MeV wurden Kurven entnommen, die in dieser Arbeit nicht abgebildet sind.

Die relative Ausbeute im Minimum ( $\chi_{\min}^{\text{RBS}}$ ) wurde von Barrett /76/ in umfangreichen Computerrechnungen am Beispiel von Protonen in der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung in Wolfram - wie in dieser Arbeit - untersucht. Der

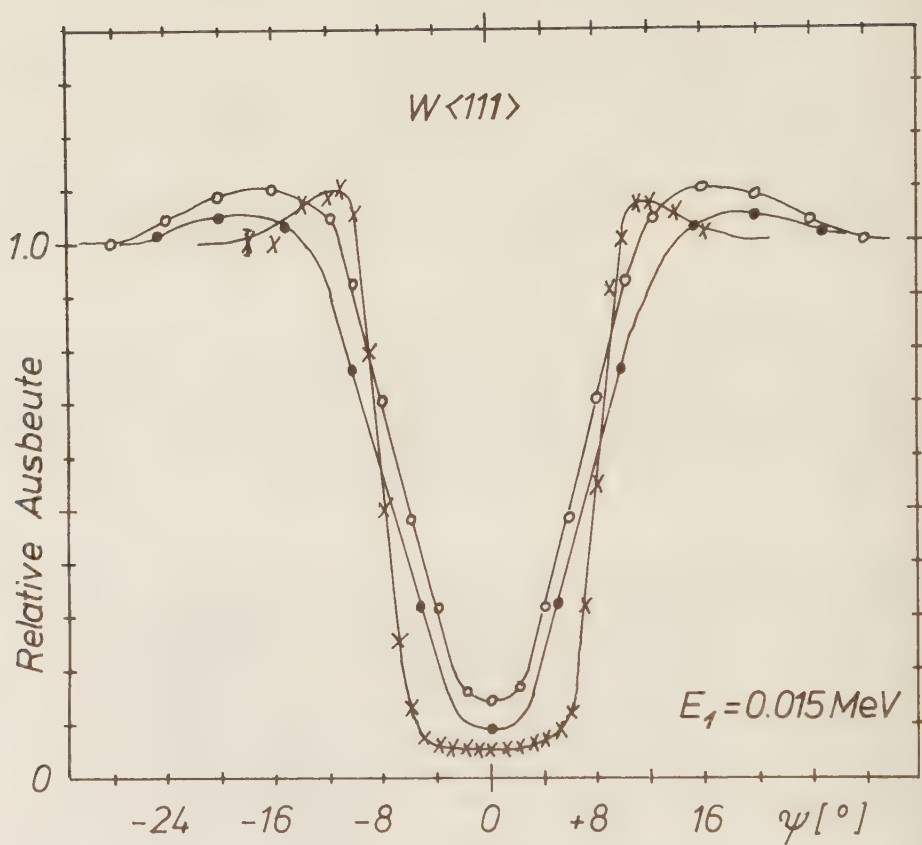


Abb. 28 a-f: experimentelle [ $\times$ -RBS,  $\circ$ -W-(N)]  
 und theoretische [ $\bullet$ -W-( $N_{4/15}$ )] Aus-  
 beutekurven:  $H^+ \rightarrow W-\langle 111 \rangle$

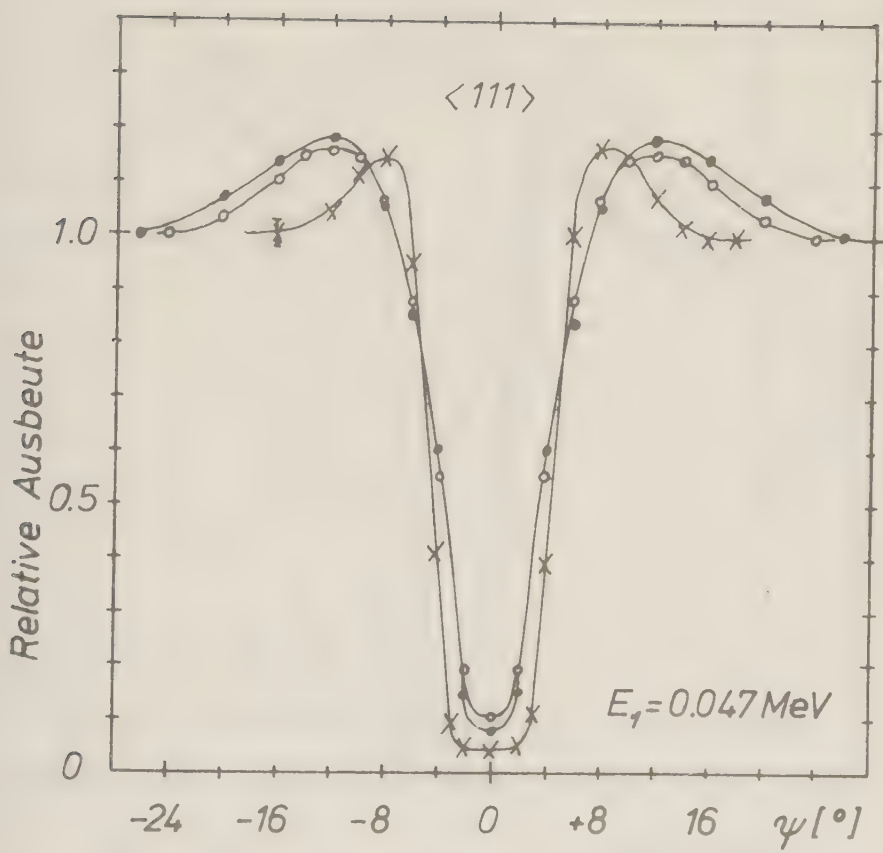


Abb. 28b

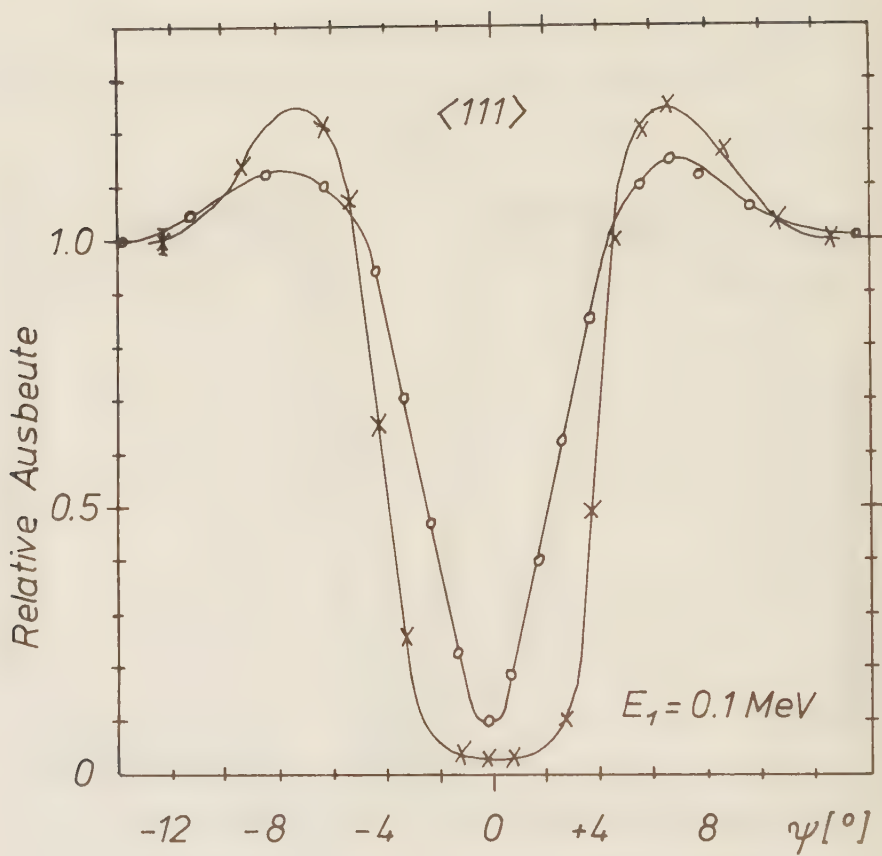


Abb. 28c

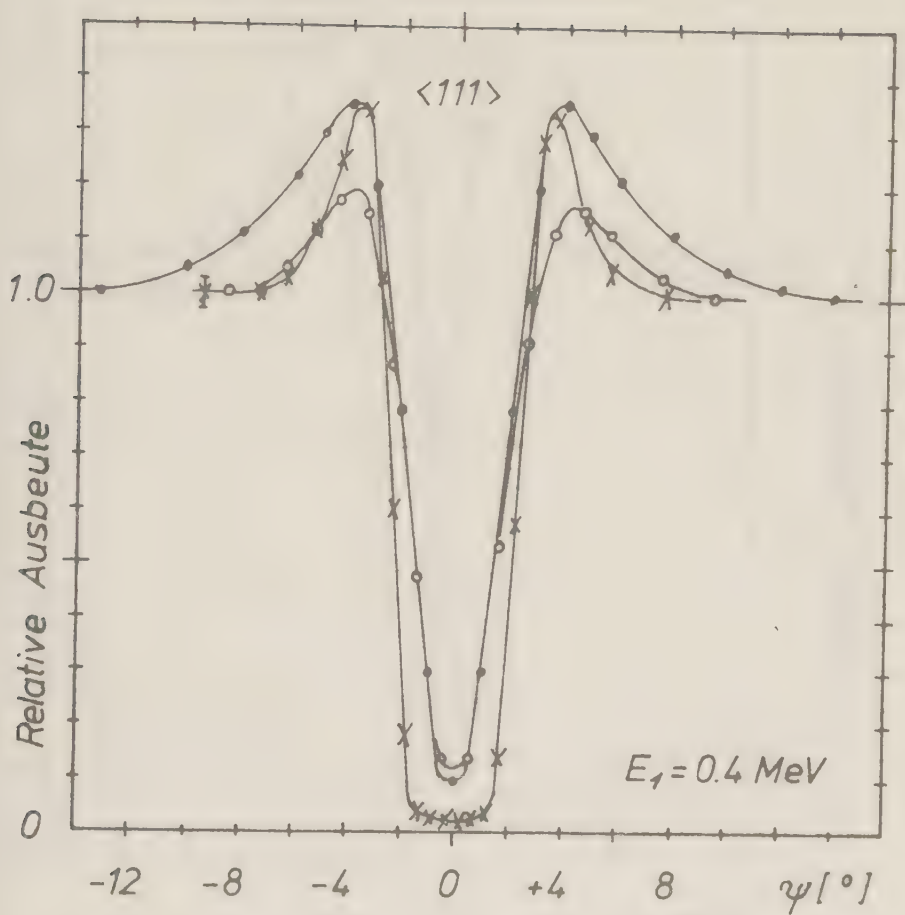


Abb. 28 d

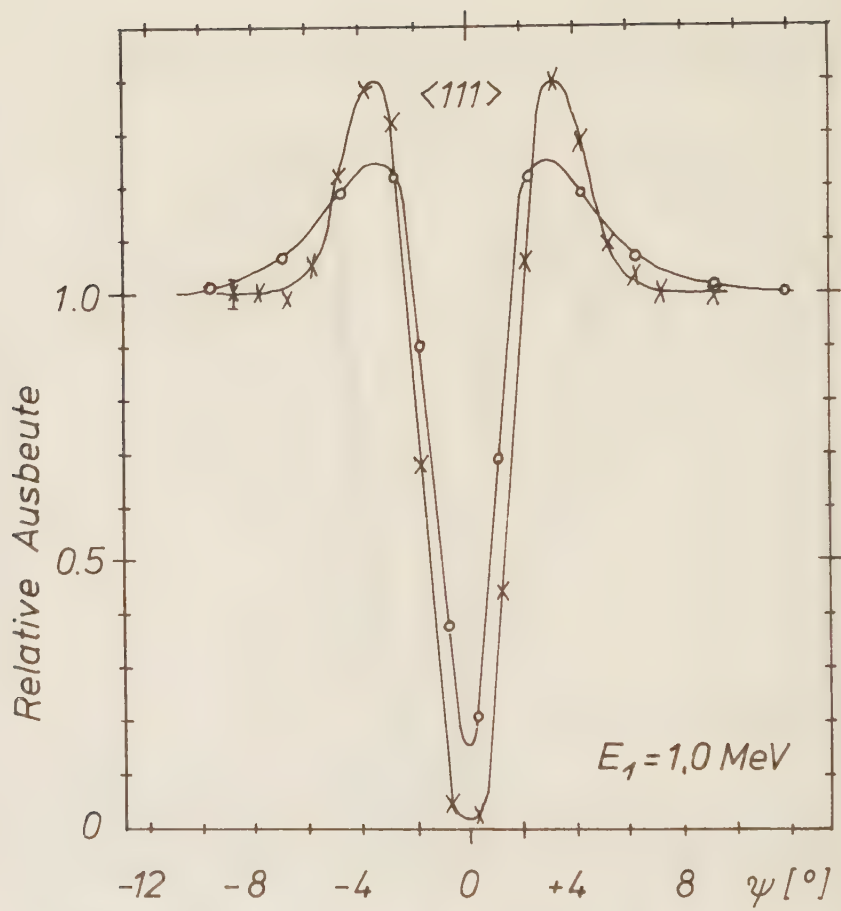


Abb. 28e

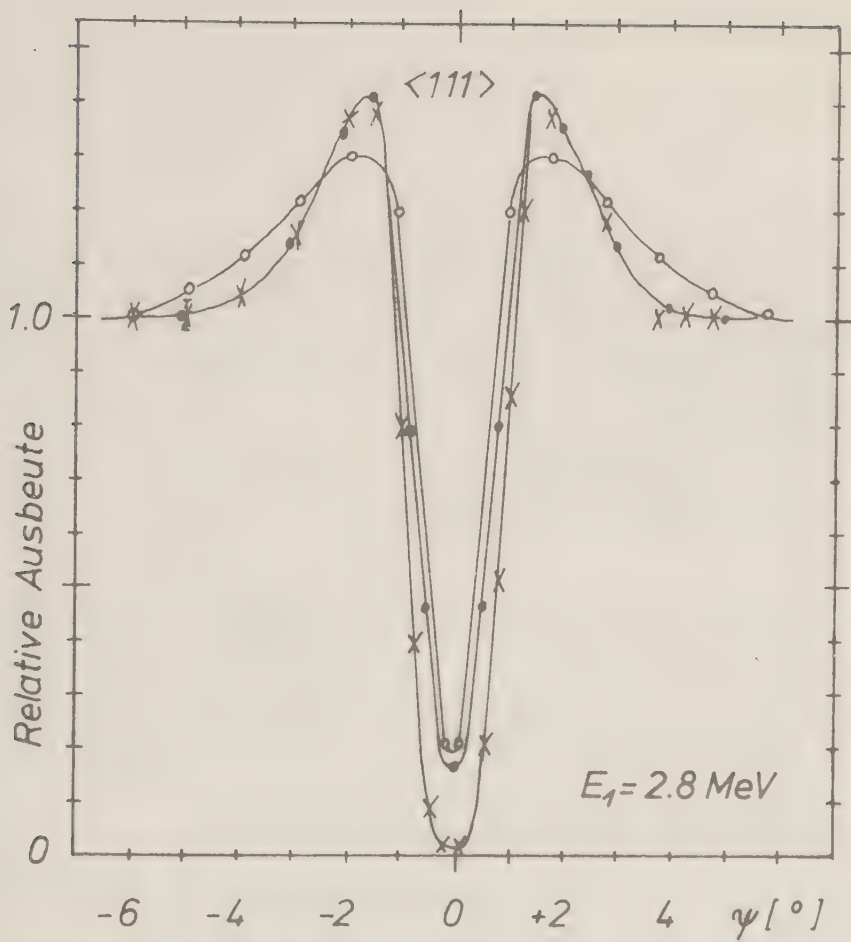


Abb. 28 f

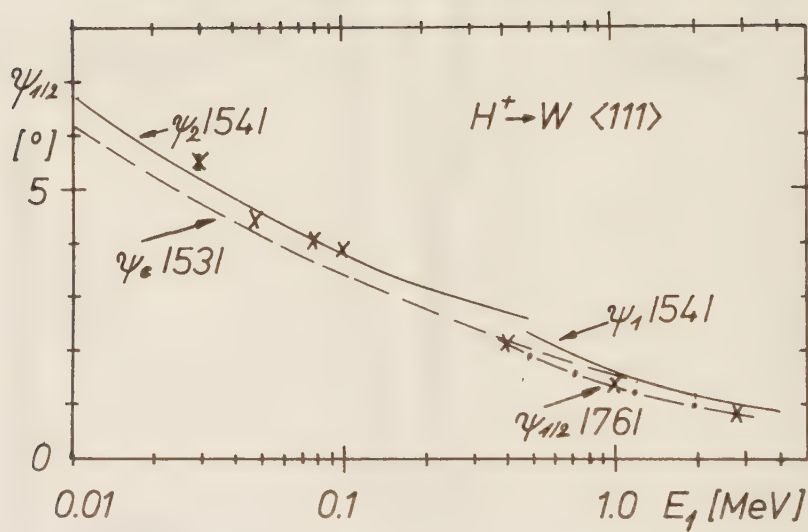


Abb. 29: Kritischer Winkel (RBS)

analytische Ausdruck, der sich den Ergebnissen besonders gut anpaßt, ist gegeben durch /35, 76/:

$$\chi_{min}^{RBS} = C_R(\Delta) 2\pi N_2 d u_1^2 (1 + \zeta^{-2})^{1/2} \quad (34)$$

$$\zeta = 2.2 u_1 / (\psi_{1/2} d), \quad C_R(0^\circ) \approx 3.0$$

$C_R(\Delta)$  ist eine Funktion der Strahldivergenz  $\Delta$ . Dieser Ausdruck wird in Abb. 30 mit den Meßwerten verglichen. Dabei zeigt sich, daß das Experiment stets Werte liefert, die um den Faktor 1,3 bis 1,4 größer als die berechneten Werte sind. Aufgrund von Abschätzungen nach /76/ kann der Einfluß einer Monolage  $WO_3$  (siehe Abschnitt 4.1.1) vernachlässigt werden. Die Diskrepanz könnte durch die endliche Strahldivergenz erklärt werden: Barrett zeigt, daß für 3 MeV Protonen die Minimalausbeute beim Übergang von  $\Delta = 0,1^\circ$  auf  $0,2^\circ$  um etwa den Faktor 1,9 anwächst. Ferner können die Differenzen auch von Störungen innerhalb des Kristalls herrühren.

Totaler Röntgenwirkungsquerschnitt. Protonen mit der Anfangsenergie  $E_1$  fallen unter einem Winkel  $\psi$  zur Oberflächennormalen auf einen Kristall. Dort erzeugen sie in der Tiefe  $(z, z+dz)$  Röntgenquanten, die von einem Detektor unter dem Winkel  $\delta$  zur Strahlachse beobachtet werden. Strahlachse, Oberflächennormale und Beobachtungsrichtung liegen in einer Ebene. Für die gemessene Ausbeute  $Y$  monoenergetischer Strahlung ergibt sich pro einfallendem Proton /77/:

$$Y(E_1) = \frac{\eta_D \Omega}{4\pi} \int_0^\infty n(z/\cos\psi) \sigma_x(E(E_1, z/\cos\psi) \times \exp(-\mu z/\cos(\delta-\psi)) dz/\cos\psi \quad (35)$$

$\eta_D$  ist die Effizienz des Detektors für die zu messende Strahlung und  $\Omega$  sein Raumwinkel;  $n$  ist das Konzentrationsprofil der anzuregenden Atome und  $\sigma_x$  der Röntgenwirkungsquerschnitt. Differenziert man obige Formel nach  $E_1$  und macht die Annahme, daß die Konzentration  $n$  überall den Wert  $n(0)$ , wie an der Oberfläche hat, so folgt /78, 79/

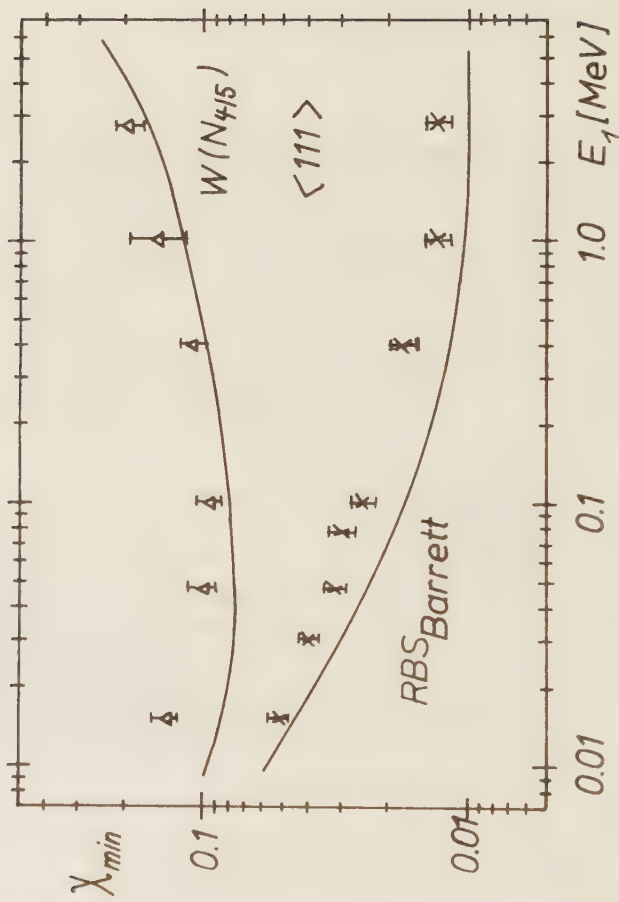


Abb. 30: Minimalausbeute

$$\sigma_x = \frac{4\pi}{\eta_0 \Omega n(0)} \left\{ \left( \frac{dE}{dz} \right)_{E_1} \frac{dY}{dE_1}(E_1) + \mu \frac{\cos \psi}{\cos(\delta - \psi)} Y(E_1) \right\} \quad (36)$$

Zur Auswertung nach dieser Formel wurden die Randomwerte der Meßkurven (Abb. 28a - f) verwendet. Da das Auflösungsvermögen des Proportionalzählrohrs im Bereich der ultraweichen Röntgenstrahlung in der Gegend von 90 % liegt, muß noch die Kohlenstoff-(K)-Linie berücksichtigt werden. Sie entsteht durch Kohlenstoffverunreinigungen (76 ppm Atomkonzentration /80/) im Wolframkristall (Reinheit 99,996). Die Ausbeute ergibt sich aus Formel (35). Der Ionisationswirkungsquerschnitt wurde /46/ und die Fluoreszenzausbeute /81/ entnommen. Für den ungünstigsten Fall ( $E_1 = 0,4$  MeV) beträgt der Anteil der Kohlenstoffstrahlung etwa 6 %; bei dieser Energie ist der Ionisationswirkungsquerschnitt für K-Anregung von Kohlenstoff maximal.

Infolge der starken Absorption der Wolfram-(W)-Strahlung und einer schwachen Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts überwiegt der zweite Term in Gleichung (36) im gesamten gemessenen Energiebereich.

Die Kenntnis der Fluoreszenzausbeuten  $\omega_4 \approx \omega_5 = 1,2 \cdot 10^{-4}$  /45/ erlaubt die Berechnung von experimentellen Ionisationswirkungsquerschnitten. Diese, sowie die aus den SCA-Rechnungen erhaltene Kurve, sind in Abb. 21 eingetragen. Für Protonenenergien bis 400 keV stimmen die gerechneten und die experimentellen Werte innerhalb der Fehlergrenzen überein. Nach höheren Energien hin, ist der experimentelle Wirkungsquerschnitt größer als der theoretische. Die Gründe hierfür können folgende sein:

Die Bremsstrahlung von Sekundärelektronen (Elektronen aus Stößen mit schwach gebundenen Elektronen,  $\delta$ - und Auger-Elektronen /50/) macht sich dann bemerkbar, wenn der maximale Energieübertrag an ein freies Elektron  $[T_m \approx 4(m_e/M_1)E_1]$  in die Größe der Energie der beobachteten Röntgenlinie kommt /32/. Für die W-(W)-Linie entspricht das einer Protonenenergie von etwa 100 keV. Erfahrungen an der W-(M)-Linie zeigen, daß dies zu einem nicht zu vernachlässigenden Untergrund führen kann /83/.

Bei hohen Projektilgeschwindigkeiten treten Abweichungen von der Störungsrechnung erster Ordnung, die für den totalen Wirkungsquerschnitt äquivalent der ersten Bornschen Näherung ist /84/, auf /85, 86/. Störungsrechnungen höherer Ordnung wurden bisher nicht durchgeführt. Trotzdem ist die Abweichung physikalisch verständlich: bei diesen Geschwindigkeiten tragen insbesondere Stoßparameter, die vergleichbar oder größer als der Schalenradius sind, zum totalen Wirkungsquerschnitt bei. Dies bedeutet, daß die adiabatische Response des atomaren Zustandes der Induzierung eines Dipolmomentes äquivalent ist. Diese Polarisierung des Anfangszustandes bedeutet eine Erniedrigung der Anregungsenergie und damit eine effektive Vergrößerung der Ionisierungswahrscheinlichkeit. Dieser Effekt könnte mithin die Diskrepanz erklären.

Winkelabhängigkeit der Wolfram-(N)-Ausbeute. In Abb. 28a - f sind auch die berechneten und gemessenen Ausbeutekurven für die W-(N)-Linie eingezeichnet. Für 0,1 MeV und 1,0 MeV wurden keine Rechnungen durchgeführt. Die Energieabhängigkeit des kritischen Winkels  $\varphi_{1/2}$  ist in Abb. 31 aufgetragen. Die experimentellen Werte werden von der Theorie sehr gut vorausgesagt.

Die Minimalausbeuten werden in Abb. 30 miteinander verglichen. Die Abweichung bei höheren Energien könnte u.a. durch den oben erwähnten Polarisierungseffekt erklärt werden: durch ihn wird die differentielle Ionisierungswahrscheinlichkeit für große Stoßparameter gegenüber der unkorrigierten SCA-Theorie angehoben. Dies bedeutet aber nichts anderes, als daß die geführten Teilchen eine größere Wahrscheinlichkeit vorfinden, Röntgenquanten zu erzeugen. Die Minimalausbeute wächst an. Ein weiterer Grund könnte die Vernachlässigung höherer l-Terme bei der SCA-Rechnung sein: aus Abb. 19 ist zu entnehmen, daß der Beitrag zur Ionisierungswahrscheinlichkeit für große Stoßparameter von hohen l-Termen herrührt; d.h. eine Mitnahme höherer l-Terme führt zu einer Erhöhung der Minimalausbeute.

Insgesamt gesehen, kann eine gute Übereinstimmung zwischen den berechneten und den experimentell bestimmten Ausbeutekurven an W-(N)-Strahlung festgestellt werden. Der Vergleich mit den Rückstreu kurven läßt schließen, daß ein beträchtlicher Teil des geführten Strahls die Wirtsatome ionisiert. Aus diesem Grund ist die W-(N)-Strahlung für Lokalisationsexperimente nur bedingt verwendbar.

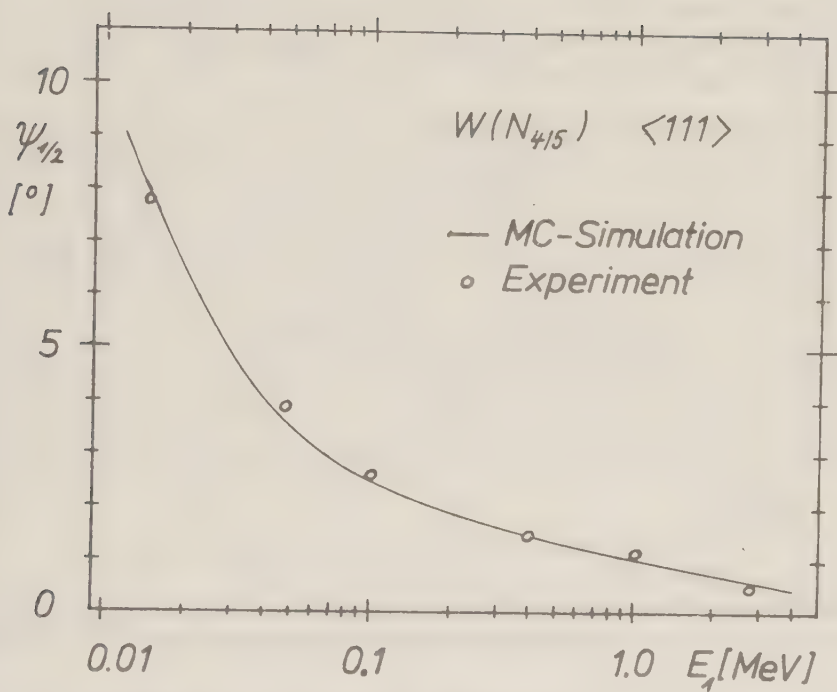


Abb. 31: kritischer Winkel

mische Schwingungsamplitude des (leichteren) Fremdatoms größer ist als die des (schwereren) Wirtsatoms.

Die Flußverteilungsmaxima und -minima werden durch Vielfachstreu-  
prozesse nivelliert. Es ist deshalb von Vorteil sich bei Lokali-  
sationsbestimmungen auf geringe Tiefen zu beschränken.

Der in dieser Arbeit zur Lokalisation verwendete Prozeß ist die  
Anregung charakteristischer Röntgenstrahlung. Eine Tiefenanalyse  
ist durch folgende Effekte (einzeln oder kombiniert) möglich:

- 1) geeignet gewähltes Implantationsprofil,
- 2) die beobachtete Strahlung des Fremdatoms wird im Wirts-  
gitter stark absorbiert,
- 3) der Wirkungsquerschnitt nimmt sehr stark mit der Energie  
ab,
- 4) großer Energieverlust der Projektile.

Große Absorptionskoeffizienten erhält man für weiche Röntgenstrah-  
lung ( $\hbar\omega < 1$  keV). Da diese Strahlung aus äußeren Schalen kommt,  
besteht die Möglichkeit, daß der geführte Anteil des Projektil-  
strahls merkbar anregt. Dies jedoch erschwert die Interpretation  
der Ausbeutemeßkurven teils beträchtlich /88/. Die W(N)-Linie und,  
für Energien größer 1 MeV /83/, die W(M)-Linie sind also nur be-  
schränkt verwendbar.

Die Punkte 3) und 4) werden durch die Pauli-Anregung (siehe folgen-  
der Abschnitt) erfüllt. Weitere Vorteile sind der große Wirkungs-  
querschnitt und die Möglichkeit, durch Wahl der Projektilenergie  
selektiv Röntgenstrahlung anzuregen /92/.

### 5.2.2 Pauli-Anregung

Das vorliegende Lokalisierungsexperiment wurde an in Wolfram im-  
plantierten Kupfer durchgeführt. Dabei wurde durch Nachbeschuß mit  
Kupferionen die Cu(L)-Linie angeregt. Der Anregungsmechanismus die-  
ser Linie durch Cu-Cu Stöße unterscheidet sich grundsätzlich von  
der in Abschnitt 5.1 beschriebenen Coulomb-Anregung durch Protonen  
/93, 94/.

Der wesentliche Unterschied ist hier, daß das störende Coulombpoten-  
tial des Projektils ( $Z_1 = 29$ ) nicht mehr klein gegenüber der Cou-  
lombkraft des Targetkerns ist ( $Z_2 = 29$ ). Dies bedeutet, daß die Ver-

wendung von Atomorbitalen in einer Störungsrechnung sicher eine schlechte Näherung darstellt. Eine wesentlich bessere Basis werden die Lösungen der stationären Zweizentren-Schrödingergleichung für das Cu-Cu Molekül sein. Für ein Ar-Ar Molekül sind die diabatischen elektronischen Niveaus als Funktion des internuklearen Abstandes in Abb. 33 /95/ aufgetragen:

Bei großem Abstand der beiden Stoßpartner können die elektronischen Zustände des Systems durch die getrennten Wellenfunktionen des Atoms und des Ions beschrieben werden. Läßt man den Abstand auf Null schrumpfen, so erhält man ein Atom, dessen Kernladungszahl die Summe der Kernladungszahlen der beiden Stoßpartner ist. Zwischen diesen beiden Extremen bilden Ion und Atom ein Quasimolekül, dessen Elektronen-Energiezustände eine Funktion des Abstandes sind. Das Korrelationsdiagramm zeigt, daß sich Niveaus überschneiden können. Die Besetzung der Molekülniveaus wird durch das Pauli-Prinzip geregelt (Pauli-Anregung /85/). Elektronenübergänge finden mit erhöhter Wahrscheinlichkeit an den Kreuzungsstellen statt (electron promotion). Trennen sich die beiden Stoßpartner wieder, so sind untere Niveaus teilweise unbesetzt. Diese Löcher können unter Emission von Röntgenstrahlung wieder aufgefüllt werden.

Für symmetrische Stoßpartner ( $Z_1 = Z_2$ ) ist der Wirkungsquerschnitt am größter. In asymmetrischen Fällen zeigen sich dann Maxima, wenn das ausgesuchte Energieniveau mit einem Energieniveau des Stoßpartners nahezu übereinstimmt /32/. Die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes zeigt am Beispiel  $Kr^+ \rightarrow Sb$ ,  $Kr^+ \rightarrow Si$  Abb. 34 /95/:

Unterhalb einer gewissen Energie (cut-off) ist keine Anregung mehr möglich. Dann folgt ein steiler Anstieg, der bei größeren Energien in eine nur noch flach ansteigende Kurve mündet. Dies, zusammen mit dem relativ großen Energieverlust schwerer Ionen, liefert die bei der Lokalisation gewünschte Beschränkung auf kleine Tiefen.

Die Abbruchenergie hängt von der Ion-Target-Kombination ab. Sie gestattet eine Auswahl der gewünschten Strahlung durch Vorgabe einer bestimmten Projektilenergie. Das Cut-off-Verhalten des Wirkungsquerschnittes kann mit Hilfe des Korrelationsdiagramms verstanden werden: Die Ionisation der 2p-Schalen erfolgt vornehmlich durch 4f $\sigma$ -Promotion. Der steile Anstieg des 4f $\sigma$ -Niveaus geschieht

MOLECULAR ORBITAL DIAGRAM FOR AN ARGON-ARGON SYSTEM  
(Reproduced from Ref.6.)

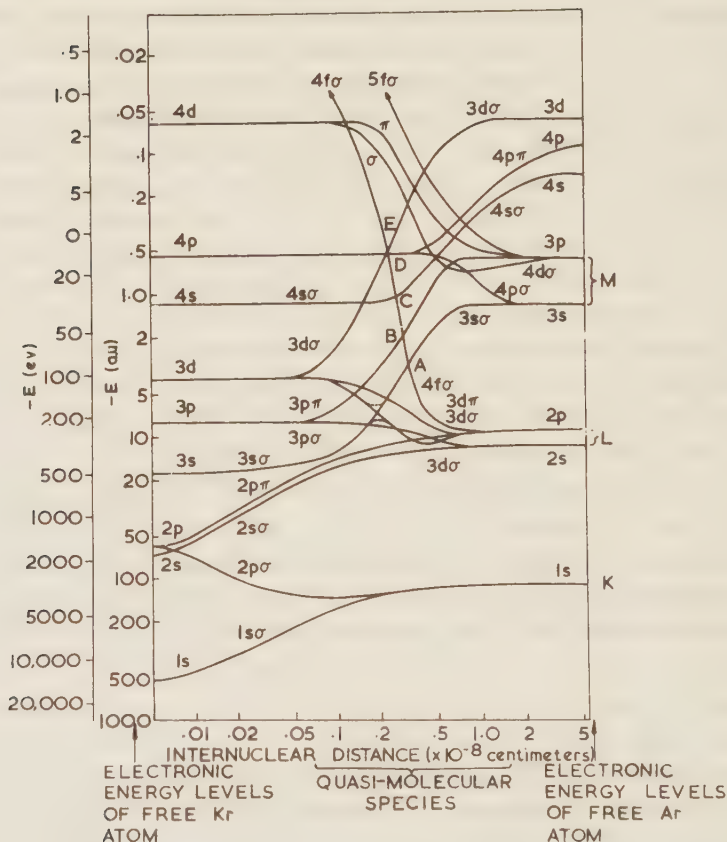


Abb. 33: Korrelationsdiagramm Ar-Ar 1951

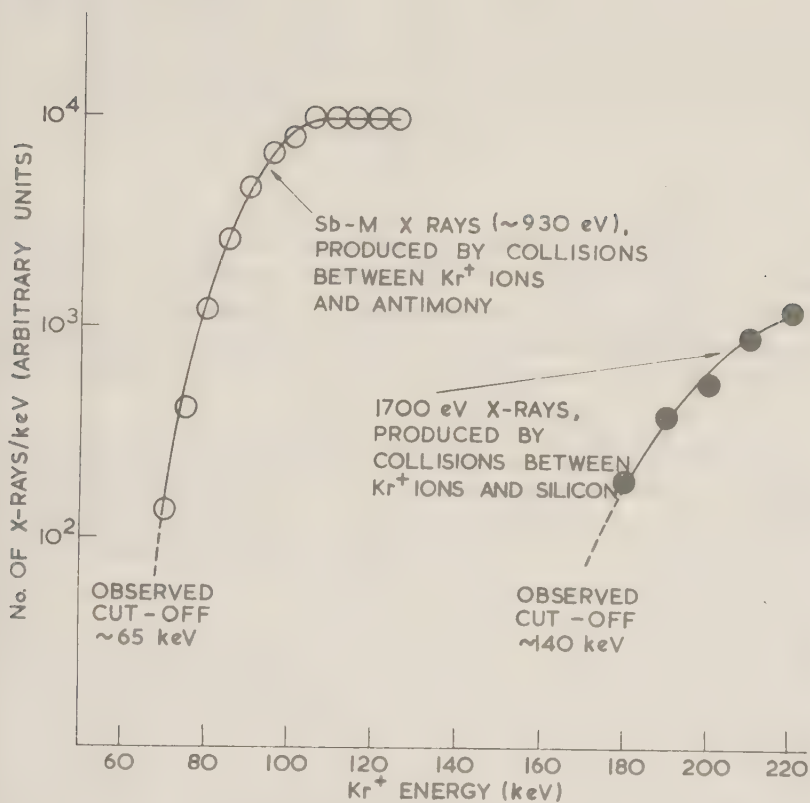


Abb. 34: Energieabhängigkeit und Selektivität der Pauli - Anregung 1951

bei internuklearen Abständen, bei denen die 2p-Schalen beider Stoßpartner anfangen sich zu überlappen. Dies bedeutet, daß keine Promotion und damit keine Ionisation erfolgt, wenn die kinetische Energie des Projektils nicht ausreicht, eine hinreichende Durchdringung beider Stoßpartner zu gewährleisten. Gleichzeitig erhält man eine nahezu rechteckige Ionisierungswahrscheinlichkeit als Funktion des Stoßparameters, die bei dem doppelten 2p-Schalen-Radius abbricht. Für  $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Cu}$  ergibt sich hierfür 9 pm /96/.

### 5.2.3 Ergebnisse

In Abb. 35 sind die Meßergebnisse des Lokalisationsexperiments dargestellt. Die Wolfram-(M)-Ausbeute rührt von Protonen-Wolfram-Stößen her (nach Andersen und Davies /83/ verlaufen die Ausbeutekurven für Anregung von W(M)-Strahlung und Rutherford-Rückstreuung, bezogen auf dieselbe Tiefe, gleich). Sie macht also Aussagen über das Wirtsgitter vor und nach der Implantation.

Die Kupfer-(L)-Linie wird zu über 98 % durch Kupfer-Kupfer-Stöße hervorgerufen. Der Rest stammt von Kupfer-Wolfram-Stößen. Diese Aussage ergibt sich durch Extrapolation der Konzentrationsaufbaukurve nach 0 % Kupferionen. Die Kupferstrahlung wird immer dann erzeugt, wenn sich die beiden Stoßpartner auf weniger als 9 pm nähern (siehe 5.2.1). Dieser Abstand ist kleiner als der Thomas-Fermi-Abschirmradius  $a_{\text{TF}}(\text{Cu-Cu}) \approx 11 \text{ pm}$ . Die Röntgenausbeutekurven sind identisch den Rutherford-Rückstreckkurven, bezogen auf die gleiche Tiefe /96/. Die Cu(L)-Linie gibt somit Auskunft über die Lage der Fremdatome.

Die projizierte Reichweite  $R_p$  von 85 keV Kupferionen in Wolfram ist etwa 16 nm, die Reichweitenstreuung  $\Delta R_p$  etwa 12 nm (beide Werte wurden aus /72/ für die Kombination  $\text{Zn}^+ \rightarrow \text{Au}$  entnommen). Zum Erreichen der Sättigungskonzentration muß die Strecke  $R_p + 2\Delta R_p$  an Wolframatomten abgetragen werden /118/. Es gilt dann

$$SN_p = N_2 (R_p + 2\Delta R_p) \quad (38)$$

wobei  $N_p$  die Zahl der bis zum Eintreten der Sättigung auftreffenden Projektile ist,  $N_2$  die Targetatomdichte und  $S$  der Zerstäubungskoeffizient ist. Das Experiment liefert  $N_p = 1,85 \cdot 10^{16} \text{ Cu}^+/\text{cm}^2$  und damit ein  $S = 14,0$ . Aus der Theorie von Sigmund /98/ läßt sich der

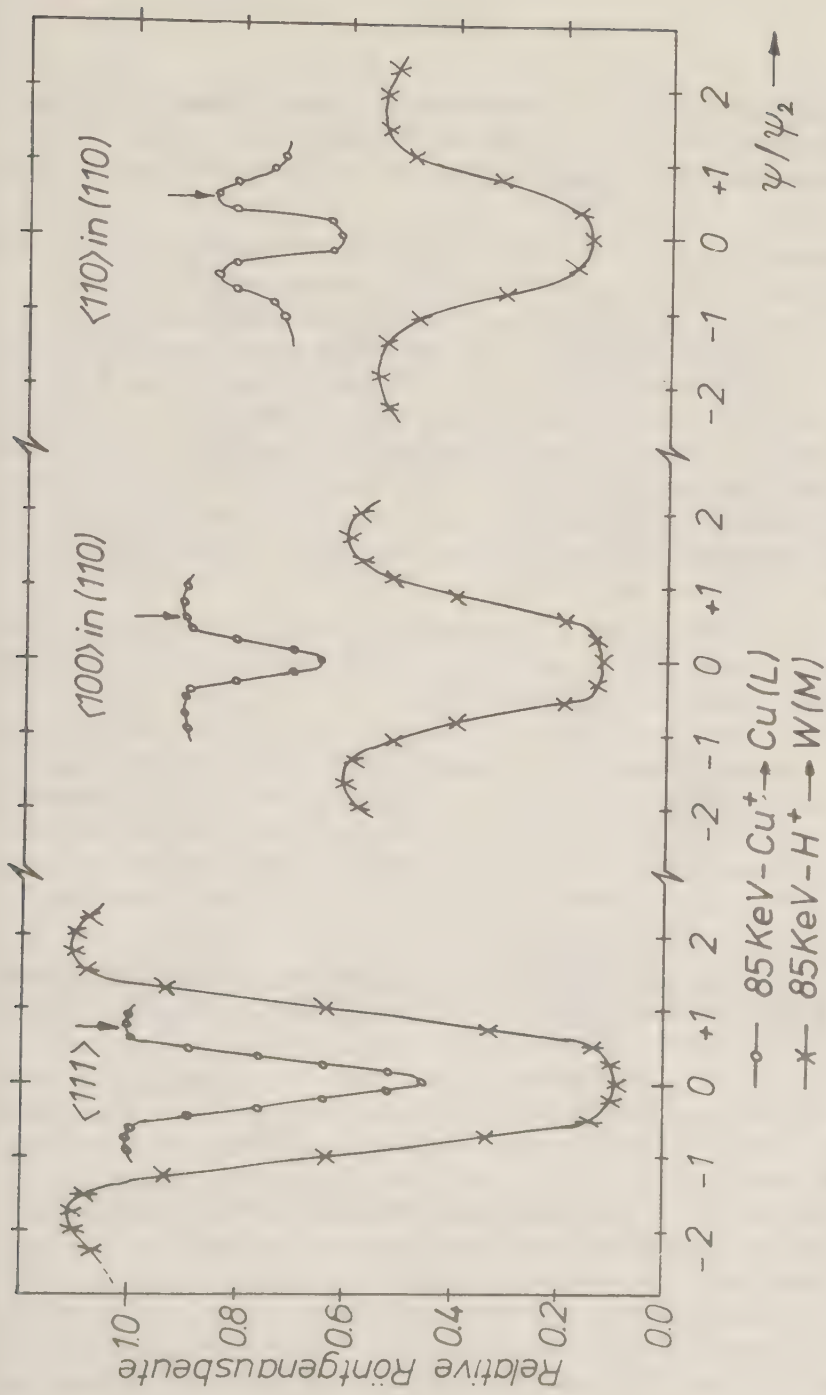


Abb. 35 : Meßergebnisse des Lokalisations-Experiments

Zerstäubungskoeffizient abschätzen. Mit einer Kohäsions(Sublimations)energie von 8,66 eV /99/ für Wolfram wird  $S = 9,1$ . Die experimentelle Sättigungskonzentration ( $\approx 1/S$ ) beträgt etwa 7 Atomprozent.

Um einen Vergleich der Meßkurven miteinander machen zu können, sind alle Kurven auf die Ausbeute in einer hochindizierten Richtung, sowie auf den kritischen Winkel  $\psi_2$  ( $\psi_2$  ( $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{W}$ ) =  $8,2^\circ$ ,  $\psi_2$  ( $\text{H}^+ \rightarrow \text{W}$ ) =  $4,0^\circ$ ) normiert worden. Bei allen Kurven wurde die Absorption bereits berücksichtigt. Eine Normierung auf gleiche Tiefe ist mit den beiden Röntgenlinien nicht möglich. Beachtet man den Energieverlust /72/, den Wirkungsquerschnitt zur Erzeugung charakteristischer Röntgenstrahlung /32, 48, 81/ und die Absorption in Wolfram /70, 100/, so gelangt man zu Tiefen, aus denen 90 % der Strahlung kommt für die W(M)-Linie von etwa 140 nm und für die Cu(L)-Linie von etwa 6 nm.

Die Ausbeutekurven für Kupferstrahlung zeigen in allen drei Richtungen Minima. Aus diesem Grund scheiden von vorneherein reine Zwischengitterplätze wie Oktaederlagen  $(1/2, 1/2, 0)$ ,  $(1/2, 0, 0)$  und Tetraederlagen  $(1/4, 1/4, 1/4)$  aus. Diese müßten überall zentrale Maxima zeigen /101/. Hexaederplätze  $(1/4, 1/4, 1/4)$  sowie Pyramidenplätze  $(1/3, 1/3, 0)$ ,  $(1/6, 1/6, 1/2)$  kommen aus energetischen Gründen im bcc-Gitter nicht in Frage /102/. Würden die Kupferatome vorwiegend auf Gitterplätzen sitzen, müßten die vergleichbaren Ausbeutekurven gleiche kritische Winkel haben. Auch dies ist nicht festzustellen.

Die in der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung zu beobachtenden nicht zentralen Maxima deuten auf Lagen außerhalb der Kanalmitte hin. Es wird versucht, die Kurven mit Hantellagen (Split) zu interpretieren. Abb. 36a zeigt eine der möglichen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Hantellagen im kubisch-raumzentrierten Gitter. Sämtliche möglichen Lagen müssen nun auf eine zur untersuchten Richtung senkrechten Ebene projiziert werden. Abbn. 36b - d geben die räumliche Verteilung der  $\langle 110 \rangle$ -Hantel in der  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$ -Richtung an. Der größte Atomabstand von einer Kette bestimmt die Lage des Ausbeutemaximums; die Breite ist durch die Abstände der restlichen Hantelprojektionen von der Kette gegeben /102/. In Tabelle 7 ist die zu erwartende Lage des Maximums für drei verschiedene Hantellagen und drei Richtungen angegeben; 2c ist dabei der Abstand der

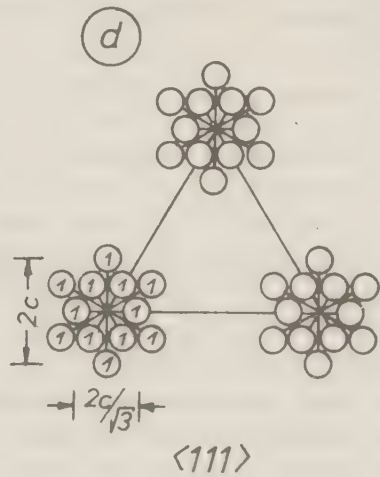
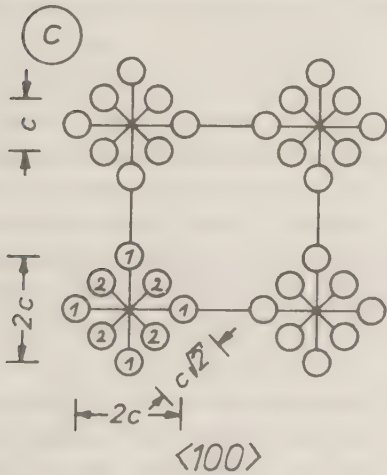
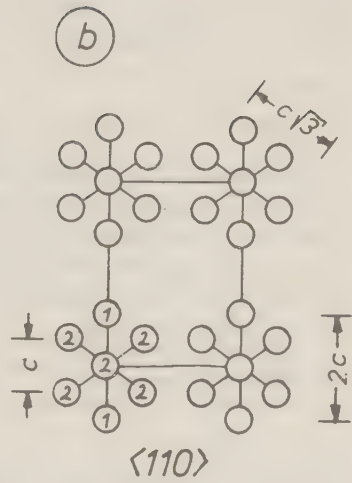
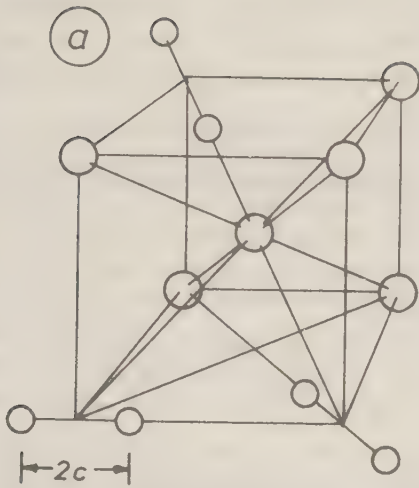


Abb. 36: (a)  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$ -Hantel

(b), (c), (d) Projektionen der  $\langle 110 \rangle$ -Hantel

beiden Atome in einer Hantel.

Tabelle 7: Lage der Ausbeutemaxima einer Hantel in verschiedenen Richtungen im bcc-Gitter

|                              | $\langle 111 \rangle$ | $\langle 100 \rangle$ | $\langle 110 \rangle$ |
|------------------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| $\langle 111 \rangle$ -Split | $(\sqrt{2/3}) c$      | $c/\sqrt{3}$          | $c$                   |
| $\langle 100 \rangle$ -Split | $\sqrt{2/3} c$        | $c$                   | $c$                   |
| $\langle 110 \rangle$ -Split | $c$                   | $c$                   | $c$                   |
| gemessen                     | 83 pm                 | 82 pm                 | 86 pm                 |

Vergleicht man die Lage der Maxima in diesen niedrigindizierten Richtungen, so kann eine Aussage über die Art der Hantel gemacht werden.

Im vorangegangenen Abschnitt 5.2.1 wurde gezeigt, wie man vom Winkel, bei dem das Maximum auftritt, auf die Lage (genauer: Äquipotentiallinie) schließen kann. Nimmt man fernerhin an, daß bei den Meßkurven in der  $\langle 111 \rangle$  - und  $\langle 100 \rangle$  -Richtung ebenfalls nicht zentrale Maxima vorliegen (deren Ausläufer nicht gemessen werden konnten), so erhält man die in Tabelle 7 angegebenen Abstände von der Kette. Die zur Berechnung nach (37) verwendeten Winkel sind in Abb. 35 mit Pfeilen markiert; ferner wurden Kettenpotentiale nach Lindhard /54/ verwendet.

Die gute Übereinstimmung der drei Zahlenwerte deutet im Vergleich mit den anderen Angaben in Tabelle 7 auf eine  $\langle 110 \rangle$  -Hantel mit einem Hantelabstand von  $2c \approx 0,2$  nm hin. Sieht man sich nochmals Abbn. 36b - d an, so müßte, gemäß weiter oben gemachten Anmerkungen, das Maximum in  $\langle 110 \rangle$  -Richtung schmaler als diejenigen in den beiden anderen Richtungen sein. Das Experiment gibt auch hierauf einen Hinweis. Aus den Messungen kann allerdings nicht festgestellt werden, ob reine Kupfer-Kupfer-Hanteln, reine Kupfer-Wolfram-Hanteln oder eine Mischung beider Arten vorliegen.

Swanson et al. /103/ machten mit der Rutherford-Rückstreuung Lokalisationsexperimente an Aluminiumlegierungen, die Mangan, Zink, Zinn und Silber (alle  $\leq 0,1$  Atomprozent) enthielten. Aus der Analyse des  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ , (100) und (111)-Channelings wird für Mn, Zn und Ag auf eine  $\langle 100 \rangle$ -Hantelkonfiguration geschlossen.

Mit Hilfe der Röntgenmethode zeigten u.a. Kool et al. /104/, daß Argonatome, in Eisen- oder Nickeleinkristalle implantiert, zu wenigstens 90 % keine festen Positionen im Wirtsgitter einnehmen. In /105/ wurden mit Phosphor und Schwefel implantierte Germaniumkristalle untersucht. Die Auswertung der Röntgenausbeutekurven in  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$ -Richtung lassen für Phosphor eine substitutionelle Lage und für Schwefel eine Lage etwas außerhalb der Ketten, bevorzugt der  $\langle 111 \rangle$ -Richtung ( $> 30$  pm), erkennen.

Wolframkristalle wurden auch mit Deuterium, Bor und Radon dotiert. Lokalisierungsexperimente mit Hilfe von Kernreaktionen ergaben für Deuterium eine Tetraederlage /106/, für Bor eine Oktaederlage /101/ und bei Radon lagen mehr als 50 % der Fremdatome auf oder nahe substitutioneller Plätze /107/.

### 5.3 Übergang von axialer zu planarer Gitterführung /108 - 112/

#### 5.3.1 Modellvorstellung /111/

Wird ein Strahl schneller positiver Teilchen, der ursprünglich parallel einer niedrigindizierten Richtung einfiel, längs einer niedrigindizierten Ebene gedreht, so zeigt die Ausbeutekurve mehr oder weniger stark ausgeprägte Schultern im Übergangsgebiet zwischen axialer und planarer Gitterführung. Die Schultern lassen auf eine Zunahme der Dechanneling-Rate schließen, bedingt durch ein Anwachsen der Querenergie.

Teilchen, deren Querenergie größer als  $E_1 \psi_a^2$  ist, werden an einer Atomkette nicht mehr korreliert gestreut. Verwendet man ein Thomas-Fermi-Potential in der Molièreschen Näherung (s.a. Abschnitt 5.1.4), so erhält man /111/

$$E_1 \psi_a^2 = (2Z_1 Z_2 e^2 / d_a) \sum_{i=1}^3 \alpha_i K_0(\beta_i r_c / a_{TF}) \quad (39)$$

$\psi_a$  ist der maximale Winkel zur Kette,  $d_a$  der Abstand der Atome in der Kette und  $r_c$  die minimale Annäherung der Projektile an die Kette /53/.

Wird nun der Einschußwinkel längs einer Ebene vergrößert, so ist für eine korrelierte Streuung an den Atomketten dieser Ebene eine Querergerie (zu diesen Ketten) nötig, die größer  $E_1 \psi_{ap}^2$  ist. Für Teilchen, die sich in der Mitte zwischen zwei Ebenen bewegen, wird diese Grenzergerie minimal. Unter Verwendung obigen Molière-Potentials läßt sich schreiben /111/:

$$E_1 \psi_{ap}^2 = \frac{\pi}{4} \frac{d_{ap}}{a_{Tf}} \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d_{ap}} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i \exp(-\beta_i d_{ap} / 2a_{Tf}) \quad (40)$$

wobei  $d_p$  der Ebenenabstand und  $d_{ap}$  der Abstand der Atomketten in der Ebene ist.

Das Verhältnis  $\psi_{ap} / \psi_a$  sollte demnach ein Maß für die Stärke (Höhe und Breite) der Schultern im Übergangsgebiet sein; es ist abhängig von der Kristallgeometrie und der Einschüßenergie, die implizit in  $r_c$  enthalten ist. Die Schultern sollten mit wachsendem  $\psi_{ap} / \psi_a$  immer ausgeprägter werden.

### 5.3.2 Vergleich mit Experiment

In /83/ wurde gezeigt, daß für die hier verwendete Protonenenergie von 150 keV die Channeling-Ausbeutekurven von Rutherford-Rückstreuung und Wolfram(M)-Messungen, bezogen auf die gleiche Tiefe, nicht mehr zu unterscheiden sind. Die Tiefe von etwa 150 nm, aus der neunzig Prozent der gemessenen Strahlung kommen, ist durch die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes /48, 113/ bedingt und nicht durch den Absorptionskoeffizienten ( $\mu = 2,89 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1} / 100, 111$ ). Wäre jener von überwiegendem Einfluß, würde sich bei Änderung der Meßgeometrie die effektive Tiefe, in der die Röntgenstrahlung entsteht, ändern. Da der Anteil der dechannelten Teilchen jedoch von der Tiefe abhängt, würde dies einen Einfluß auf die Stärke der Schultern haben.

Abb. 37 zeigt die auf "random" normalisierten Ausbeutekurven an Wolfram-(M)-Strahlung (1,77 keV) als Funktion des Einschüßwinkels zur  $\langle 110 \rangle$ - bzw.  $\langle 111 \rangle$ -Richtung. Die Ebene, in der der Strahl

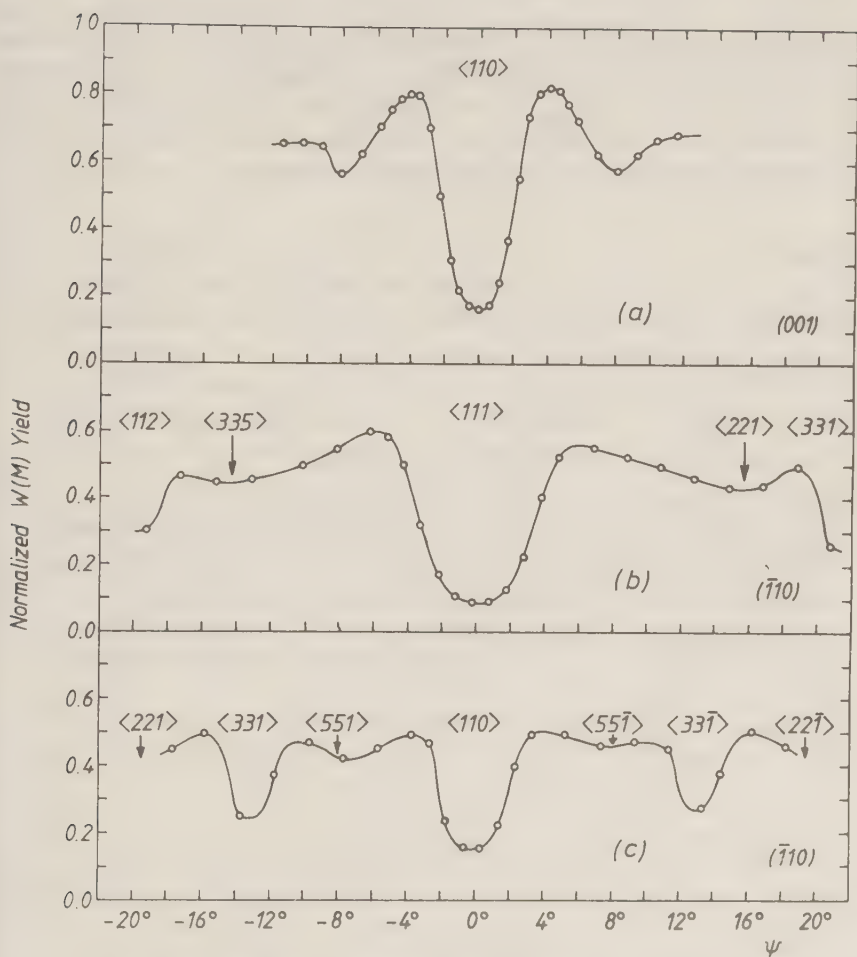


Abb. 37:  $W$ -( $M$ )-Ausbeute als Funktion des Einschufßwinkels

gedreht wurde, ist angegeben, sowie weitere Richtungen, die hierbei durchlaufen wurden. In Abb. 16 wurden die Wege ② und ③ genommen. Für ② muß der Beobachtungswinkel  $\varphi$  korrigiert werden:  $\cos \psi = \sin^2 \vartheta_p \cos \varphi + \cos^2 \vartheta_p$ , wobei  $\vartheta_p$  der Polarwinkel ist.

In Tabelle 8 sind die im vorausgegangenen Abschnitt eingeführten Größen für das vorliegende Experiment aufgelistet. Ein Vergleich mit den Meßkurven zeigt, daß mit wachsendem  $\psi_{ap}/\psi_a$ -Verhältnis die Stärke der Schultern zunimmt. Hiermit ist die Aussage des theoretischen Modells /111/ voll bestätigt worden.

Tabelle 8

| Übergang                                      | $\psi_a / 80^\circ$ | $\psi_{ap}/\psi_a$ | Schultern                                                                         |
|-----------------------------------------------|---------------------|--------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| $\langle 110 \rangle \rightarrow (001)$       | $2,4^\circ$         | 0,72               | stark                                                                             |
| $\langle 111 \rangle \rightarrow (\bar{1}10)$ | $3,5^\circ$         | 0,46               |  |
| $\langle 110 \rangle \rightarrow (\bar{1}10)$ | $2,4^\circ$         | 0,40               |                                                                                   |
| $\langle 331 \rangle \rightarrow (\bar{1}10)$ | $1,7^\circ$         | 0,34               |                                                                                   |
| $\langle 112 \rangle \rightarrow (\bar{1}10)$ | $1,6^\circ$         | 0,32               |                                                                                   |
|                                               |                     |                    | schwach                                                                           |

## 6. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde im ersten Teil die Konzeption und der Aufbau eines universellen kleinen Schwerionenbeschleunigers beschrieben. Dieser zeichnet sich zum einen durch eine große Auswahl von zu verwendenden Ionen aus (Festkörper-Zerstäubungs-Quelle) und zum anderen durch ein weitgehend kohlenwasserstoff-freies Vakuum.

Im zweiten Teil werden zwei Experimente beschrieben und diskutiert:

- 1) die Anregung der W-(N)-Strahlung bei Beschuß eines Wolfram-Einkristalls durch Protonen im Energiebereich zwischen 0,015 und 2,8 MeV. Die Messung der W(N)-Ausbeute bei Einschuß in  $\langle 111 \rangle$  konnte durch eine Monte-Carlo-Simulation quantitativ beschrieben werden. Notwendig hierfür ist die Kenntnis des differentiellen Wirkungsquerschnittes für die Anregung der  $N_{4/5}$ -Schale. Dieser wurde in Störungsrechnung 1. Ordnung erhalten.
- 2) Lokalisierung von Kupfer-Atomen in einem Wolfram-Einkristall durch Anregung von Kupfer-(L)-Strahlung. Die Anisotropie der Ausbeute dieser Strahlung parallel niedrigindizierter Richtungen des Einkristalls erlaubte die Lokalisierung des ionenimplantierten Kupfers. Als wahrscheinlichste Interpretation ergab sich die  $\langle 110 \rangle$ -Hantelkonfiguration mit einer Hantellänge von 0,2 nm.

## 7. Literaturverzeichnis

- /1/ A.P. Banford, The Transport of Charged Particles  
(E. & F. Spon, London 1966)
- /2/ A. Septier (Hrsgeb.), Focusing of charged Particles  
(Academic Press, New York 1967)
- /3/ R.G. Wilson, G.R. Brewer, Ion Beams  
(J. Wiley & Sons, New York 1973)
- /4/ U. Timm, Z. f. Naturf. 10a, 593 (1955)
- /5/ R.P. Haddock, Rev. Sci. Instr. 34, 745 (1963)
- /6/ K.J. Hill, R.S. Nelson, R.J. Francis, AERE-R 6343 (1970)
- /7/ K. Wittmaack, F. Schulz, J. Vac. Sci. Techn. 10, 918 (1973)  
K. Wittmaack, Nucl. Instr. Meth. 118, 99 (1974)
- /8/ M. v. Ardenne, Tabellen zur angewandten Physik, Band 1  
(VEB Dtch. Verlag der Wissenschaften, Berlin 1962)
- /9/ K. Wittmaack, persönliche Mitteilung
- /10/ G. Braun, M.L. Renton, Nucl. Instr. Meth. 92, 477 (1971)
- /11/ E. Koltay, Gy. Szabó, Nucl. Instr. Meth. 35, 88 (1965)
- /12/ J.G. Cramer, F.H. Schmidt, Nucl. Instr. Meth. 45, 325 (1966)
- /13/ H.A. Enge, in "Focusing of Charged Particles, vol.II"  
(Academic Press, New York 1967)
- /14/ D.J. Kroon, Laboratory Magnets (Philips Technical Library,  
Eindhoven 1968)
- /15/ Technische Mitteilungen der DEW 14a (Krefeld 1967)
- /16/ C.M. Braams, Nucl. Instr. Meth. 26, 83 (1964)
- /17/ Applikationsschrift (1969), Spectromagnetic Industries
- /18/ H.A. Enge, Nucl. Instr. Meth. 28, 119 (1964)
- /19/ E.K. Müller, Vakuum-Technik 18, 75 (1969)
- /20/ J. Rüstig, Diplomarbeit München 1977
- /21/ N.W. Robinson, The Physical Principles of Ultra-High  
Vacuum Systems and Equipment (Chapman & Hall, London 1968)
- /22/ L. Holland, W. Steckelmacher, J. Larwood, Vacuum Manual  
(E. & F. Spon, London 1974)
- /23/ D. Kunze, O. Peters, G. Sauerbrey, Z. angew. Physik 22,  
69 (1967)
- /24/ M. Baker, L. Laurenson, J. Vaumoron, Le Vide 22, 22 (1967)
- /25/ H.G. Heide, Z. angew. Physik 15, 116 (1963)
- /26/ W. Becker, Vakuum-Technik 15, 211 u. 254 (1966)

- /27/ R.A. Haefer, Vakuu-Technik 10, 95 (1961)
- /28/ R.L. Jepsen, Proc. 4th Int. Vacuum Congress 1968
- /29/ J.A. Bearden, Rev. Mod. Phys. 39, 78 (1967)
- /30/ J.A. Cairns, C.L. Desborough, D.F. Holloway, Nucl. Instr. Meth. 88, 239 (1970)
- /31/ J.A. Cairns, D.F. Holloway, Nucl. Instr. Meth. 84, 579 (1971)
- /32/ J.A. Cairns, D.F. Holloway, R.S. Nelson, AERE-R 6196 (1969)
- /33/ U. Jecht, I. Petersohn, Siemens-Zeitschrift 41, 59 (1967)
- /34/ H. Schulze, IPP 7/3 (1970)
- /35/ D.S. Gemmell, Rev. Mod. Phys. 46, 129 (1974)
- /36/ ORTEC-Katalog 1977
- /37/ ORTEC: Manual zu Modell 439 (1970)
- /38/ J.A. Davies, J. Denhartog, J.L. Whitton, Phys. Rev. 165, 345 (1968)
- /39/ K. Björkqvist, B. Cartling, B. Domeij, Rad. Effects 12, 267 (1972)
- /40/ E. Bøgh, Phys. Rev. Lett. 19, 61 (1967)
- /41/ H. Scheuerecker, Diplomarbeit München 1972
- /42/ W. Wach, persönliche Mitteilung
- /43/ GSF-Bericht P 98 (1976)
- /44/ J.A. Bearden, A.F. Burr, Rev. Mod. Phys. 39, 125 (1967)
- /45/ E.J. McGuire, Phys. Rev. A9, 1840 (1974)
- /46/ J.M. Hansteen, O.M. Johnson, L. Kocbach, Atomic Data and Nuclear Data Tables 15, 305 (1975)
- /47/ J. Bang, J.M. Hansteen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 31, no. 13 (1959)
- /48/ L. Kocbach, Phys. B: Atom.Molec.Phys. 9, 2269 (1976)
- /48a/ L. Kocbach, Report No. 74, University of Bergen (1975)
- /49/ L. Kocbach, Z. Physik A 279, 233 (1976)
- /50/ K.-H. Weber, Dissertation München 1976
- /51/ D.R. Hartree, The Calculation of Atomic Structures (J. Wiley & Sons, New York 1957)
- /52/ J.P. Desclaux, Atomic Data and Nuclear Data Tables, vol. 12, no. 4 (1973)
- /53/ C. Varelas, R. Sizmann, Rad. Effects 16, 211 (1972)
- /54/ J. Lindhard, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 34, no.14 (1965)

- /55/ R.S. Nelson, The Observation of Atomic Collisions in Crystalline Solids (North-Holland, Amsterdam 1968)
- /56/ D.V. Morgan (Hrsgb.), Channeling: Theory, Observation and Applications (J. Wiley & Sons, New York 1973)
- /57/ R. Sizmann, C. Varelas, Festkörperprobleme 17 (Vieweg Verlag, Braunschweig 1977)
- /58/ D.E. Raeside, Am. J. Phys. 42, 20 (1974)
- /59/ H.-D. Carstanjen, Dissertation München 1973
- /60/ H.-D. Carstanjen, wird veröffentlicht
- /61/ G. Leibfried, Bestrahlungseffekte in Festkörpern (B.G. Teubner, Stuttgart 1965)
- /62/ Ch. Lehmann, G. Leibfried, Z. f. Physik 172, 465 (1963)
- /63/ I.M. Torrens, Interatomic Potentials (Academic Press, New York 1972)
- /64/ O.B. Firsov, Soviet Phys. JETP 6, 534 (1958)
- /65/ M. Abramowitz, I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (Dover Rebl., New York 1965)
- /66/ C. Varelas, R. Sizmann, Rad. Effects 25, 163 (1975)
- /67/ D.V. Morgan, D. van Vliet, Can. J. Phys. 46, 503 (1968)
- /68/ R.J. Glauber, Phys. Rev. 98, 1692 (1955)
- /69/ J.U. Andersen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36, no. 7 (1967)
- /70/ R. Haensel, K. Radler, B. Sonntag, C. Kunz, DESY 69/25 (1969)
- /71/ J. Lindhard, M. Scharff, J.E. Schiøtt, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33, no. 14 (1963)
- /72/ J.F. Gibbons, W.S. Johnson, St.W. Mylroie, Projected Range Statistics 2<sup>nd</sup> ed. (Dowden, Hutchinson & Ross, Stroudsburg 1976)
- /73/ D. Isaacson, Internal Report, New York University 1975
- /74/ M.A. Kumakhov, Phys. Lett. 37A, 153 (1971)
- /75/ D. van Vliet, Rad. Effects 10, 137 (1971)
- /76/ J.H. Barrett, Phys. Rev. 33, 1527 (1971)
- /77/ F.W. Reuter III, H.P. Smith jr., J. Appl. Phys. 43, 4228 (1972)
- /78/ E. Merzbacher, H.W. Lewis, Handbuch der Physik 34 (Hrsgb. S. Flügge, Springer Verlag, Berlin 1958)
- /79/ W.F. van der Weg, W.H. Kool, H.E. Roosendaal, F.W. Saris, Rad. Effects 17, 245 (1973)

- /80/ Angaben der Firma MRC
- /81/ W. Bambynek, B. Crasemann, R.W. Fink, H.-U. Freud, H. Mark, C.D. Swift, R.E. Price, P. Vemigopala Rao, Rev. Mod. Phys. 44, 716 (1972)
- /82/ F. Folkmann, C. Gaarde, T. Huus, K. Kemp, Nucl. Instr. Meth. 116, 487 (1974)
- /83/ J.U. Andersen, J.A. Davies, Nucl. Instr. Meth. 132, 179 (1976)
- /84/ D.H. Madison, E. Merzbacher, in "Atomic Inner-Shell Processes, vol. 1" (Academic Press, New York 1975)
- /85/ W. Brandt, R. Laubert, Phys. Rev. Lett. 24, 1037 (1970)  
W. Brandt, Proc. Third Int. Conf. Atomic Physics (Hrsgb. J. Smith, Plenum Press, New York 1972)
- /86/ G. Basbas, W. Brandt, R. Laubert, Phys. Lett. 34A, 277 (1971)
- /87/ H.-D. Carstanjen, in "Ion Beam Surface Layer Analysis, vol. II" (Hrsgb. O. Meyer, G. Linker, F. Käßler, Plenum Press, New York 1976)
- /88/ S.T. Picraux, New Uses of Low-Energy Accelerators (Plenum Press, New York 1975)
- /89/ D.V. Morgan, D. van Vliet, Rad. Effects 12, 203 (1972)
- /90/ R.B. Alexander, P.T. Callaghan, J.M. Poate, Phys. Rev. 39, 3022 (1974)
- /91/ S.T. Picraux, W.L. Brown, W.M. Gibson, Phys. Rev. B6, 1382 (1972)
- /92/ J.A. Cairns, Nucl. Instr. Meth. 92, 507 (1971)
- /93/ U. Fano, W. Lichten, Phys. Rev. Lett. 14, 627 (1965)
- /94/ W. Lichten, Phys. Rev. 164, 131 (1967)
- /95/ J.A. Cairns, D.F. Holloway, R.S. Nelson, AERE-R 6408 (1970)
- /96/ J.A. Cairns, A.D. Marwick, R.S. Nelson, J.S. Briggs, AERE-R 6941 (1971)
- /97/ G. Carter, J.N. Baruah, W.A. Grant, Rad. Effects 16, 107 (1972)
- /98/ P. Sigmund, Phys. Rev. 184, 383 (1969)  
Phys. Rev. 187, 768 (1969)
- /99/ Ch. Kittel, Einf. in die Festkörperphysik (R. Oldenburg Verlag, München 1973)
- /100/ W.M. Veigele, Atomic Data Tables 5, 51 (1973)

- /101/ J.U. Andersen, E. Laegsgaard, L.C. Feldmann, Rad. Effects 12, 219 (1972)
- /102/ H.-D. Carstanjen, persönliche Mitteilung
- /103/ M.L. Swanson, L.M. Howe, A.F. Quenneville, Phys. stat. sol. (a) 31, 675 (1975)  
M.L. Swanson, F. Maury, Can. J. Phys. 53, 1117 (1975)
- /104/ W.H.Kool, L.W. Wiggers, F.P. Viehböck, F.W. Saris, Rad. Effects 27, 43 (1975)
- /105/ J.F. Chemin, I.V. Mitchell, F.W. Saris, J. Appl. Phys. 45, 537 (1974)
- /106/ S.T. Picraux, F.V. Vook, Phys. Rev. Lett 33, 1216 (1974)
- /107/ B. Domeij, Nucl. Instr. Meth. 38, 207 (1965)
- /108/ H. Tittel, C. Varelas, F. Bell, Phys. Lett. 60A, 151 (1977)
- /109/ G. Della Mea et al., Phys. Rev. 87, 4029 (1973)
- /110/ A. Desalvo, R. Rosa, Phys. Rev. B9, 4065 (1974)
- /111/ U. Bill, C. Varelas, R. Sizmann, K.E. Rehm Rad. Effects 27, 59 (1975)
- /112/ Yu.V. Bulgkov, V.I. Shulga, Sov. Phys. Solid State 17, 224 (1975), Rad. Effects 28, 15 (1976)
- /113/ H. Panke, Diplomarbeit 1972
- /114/ J.H. Hubbel, Atomic Data 3 (1971)
- /115/ S. Penner, Rev. Sci. Instr. 32, 150 (1961)
- /116/ J.Slater, Phys. Rev. 36, 57 (1930)
- /117/ H.A. Bethe, E.E. Salpeter, Handbuch der Physik 25 (Hrsgb. S. Flüge, Springer Verlag, Berlin 1957)
- /118/ J.B. Mann, Los Alamos-Report LA-3691 (1968)
- /119/ Messiah, Quantum Mechanics II, (North-Holland, Amsterdam 1962)
- /120/ A. Erdélyi et al., Higer Transcendental Functions (McGraw Hill, New York 1953)
- /121/ G.N. Watson, Theory of Bessel Functions (The University Press, Cambridge 1944)
- /122/ P. Appell, K. de Fériet, Fonctions Hypergéométriques et hypersphériques (Gauthiers-Villars, Paris 1926)
- /123/ K. Alder, A. Winther, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 29, no. 18 (1955)

## 8. Anhang

### 8.1 Matrizen der ionenoptischen Elemente

In diesem Anhang sollen die für die Berechnung der ionenoptischen Eigenschaften der in Abschnitt 2.3 vorgestellten Beschleunigerelemente nötigen Matrizen aufgeführt werden.

Feldfreier Raum der Länge  $z_1$

$$\begin{pmatrix} 1 & z \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.1})$$

Elektrostatistische Optik. Die Matrix der Doppellinse ergibt sich durch Multiplikation der Matrix der Linse 1, der des feldfreien Raumes zwischen den Linsen und der der Linse 2. Nach Timm /4/ gilt für eine Rohr(immersions)linse:

$$\begin{pmatrix} -(\sqrt{N}-3)/2 & 2K/(\sqrt{N}+1) \\ -(3/8)(N-1)(\sqrt{N}-1)/KN & (3\sqrt{N}-1)/2N \end{pmatrix} \quad (\text{I.2})$$

mit  $K \approx D+d$ ,  $D$  ist der Rohrdurchmesser und  $d$  der Elektrodenabstand.  $N$  ist das Verhältnis der Energie der aus dem System austretenden Teilchen zur Eintrittsenergie.

Magnetische Quadrupole. Die Übertragungsmatrizen  $L_F$  für die fokussierende Ebene und  $L_D$  für die defokussierende Ebene lassen sich schreiben /11, 115/:

$$L_F = \begin{pmatrix} \cos \Theta & k^{-1} \sin \Theta \\ -k \sin \Theta & \cos \Theta \end{pmatrix} \quad (\text{I.3})$$

$$L_D = \begin{pmatrix} \cosh \Theta & k^{-1} \sinh \Theta \\ k \sinh \Theta & \cosh \Theta \end{pmatrix} \quad (\text{I.4})$$

wobei  $\Theta = kl$  ist. Die wirksame (effektive) Länge des Feldes  $l$  erhält man aus  $l = \int_0^\infty dz B(z)/B_0$ ;  $B(z)$  ist die Induktion auf der Achse und  $B_0$  im Inneren des Quadrupols. Der Parameter  $k$  ist definiert durch

$$k^2 = (B_0)^{-1} (dB/dr) \quad (\text{I.5})$$

Für den Feldgradienten gilt die Beziehung  $(dB/dr)_{[T/m]} = 2,25 I_{[A]}$ .  
Die magnetische Steifigkeit  $(B\rho)$  läßt sich schreiben /8/

$$B_{[T]} \rho_{[m]} = 0.144 (M_1[amu] E_1[MeV] / n_1^2)^{1/2} \quad (I.6)$$

wobei  $M_1$  die Massenzahl,  $E_1$  die Energie und  $n_1$  die Ladung des Projektils sind.

Ablenkmagnet. Die Übertragungsmatrizen für die Horizontalebene ( $L_H$ ) und für die Vertikalebene ( $L_V$ ) lauten (bei Vernachlässigung von Streufeldern) /115/ :

$$L_H = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \rho_0 \sin \alpha & \rho_0 (1 - \cos \alpha) \\ -\sin \alpha / \rho_0 & \cos \alpha & \sin \alpha \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (I.7)$$

Es liegt ein dispersives System vor.

$$L_V = \begin{pmatrix} 1 & \rho_0 \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (I.8)$$

Feldfreier Raum der Länge  $\rho_0 \alpha$ .  $\alpha$  ist der Ablenkwinkel und  $\rho_0$  der Ablenkradius.

Für die Impulsauflösung am Ort  $z_2$  nach dem Magneten gilt ( $|dB/B| < 10^{-5}$ ):

$$\left| \frac{\Delta p}{p} \right|_2 \approx \left| \left| \frac{\Delta p}{p} \right|_{z_2} \right| = \frac{|x_2| + |\hat{x}_1 / (\rho_0 \cos \alpha - z_2 \sin \alpha) / \rho_0|}{\rho_0 - (\rho_0 \cos \alpha - z_2 \sin \alpha)} \quad (I.9)$$

$2\hat{x}_1$  ist die Ausdehnung der Strahleinschnürung vor dem Magneten und  $2x_2$  der Durchmesser der Strahlblende am Ort  $z_2$ . Die Massenauflösung  $|\Delta M_1 / M_1|$  erhält man aus

$$\left| \frac{\Delta M_1}{M_1} \right| = 2 \left| \frac{\Delta p}{p} \right| + \left| \frac{\Delta E_1}{E_1} \right| \quad (I.10)$$

In Datenblättern von Magneten wird meist die Impulsdispersion  $/3/$   $x_2 / (\Delta p / p)$  für  $\hat{x}_1 \rightarrow 0$  angegeben

$$x_2 / (\Delta p / p) = 2 \rho_0 \sin^2(\alpha/2) + z_2 \sin \alpha \quad (I.11)$$

Quantitative Aussagen können Tabelle 2 entnommen werden.

### 8.2 Berechnung von Matrixelementen für Coulomb-Ionisation in zeitabhängiger Störungsrechnung erster Ordnung

Die Übergangsamplitude vom Anfangszustand  $|i\rangle$  in den Endzustand  $|f\rangle$  lautet:

$$a = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega_{if}t) \langle f | \frac{Z_1 e^2}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} | i \rangle \quad (\text{II.1})$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich dann zu

$$|a|^2 = \left( \frac{Z_1 e^2}{\hbar v_1} \right)^2 \left| \langle f | \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(iqT) dT}{[(b-x)^2 + y^2 + (T-z)^2]^{3/2}} | i \rangle \right|^2 \quad (\text{II.2})$$

$$\begin{aligned} \vec{R}(T) &= (b, 0, T) & \vec{r} &= (x, y, z) \\ T &= v_1 t & q &= \omega_{if}/v_1 = (E_f - E_A)/\hbar v_1 \end{aligned}$$

wobei  $v_1$  die Geschwindigkeit des Projektils,  $E_A$  die Bindungsenergie und  $E_f = \hbar^2 k^2 / 2m_e$  die Energie des Elektrons im Kontinuum ist. Jetzt läßt sich die Zeitintegration ausführen.

$$|a|^2 = 4 \left( \frac{Z_1 e^2}{\hbar v_1} \right)^2 \left| \langle f | e^{iqz} K_0(q\rho) | i \rangle \right|^2 \quad (\text{II.3})$$

$K_0$  ist die modifizierte Besselfunktion dritter Art und nullter Ordnung /65/,  $\rho^2 = (b-x)^2 + y^2$ .

Um den weiteren Rechengang zu vereinfachen, werden alle Größen mit Hilfe der reziproken Länge  $\alpha_A = Z_A / (n_A a_0)$  ausgedrückt (siehe Tabelle 9);  $n_A$  ist die Hauptquantenzahl des gebundenen Zustandes,  $a_0 = 52,9$  pm der Bohrsche Radius. Die effektive Kernladungszahl  $Z_A = Z_2 - Z_A^S$  berücksichtigt die innere Abschirmung des Kerns ( $Z_2$ ) durch die Elektronen. Die Abschirmkonstante  $Z_A^S$  wird bei Kocbach /46/ nach der Slater-Regel /116/ berechnet. Da für die gebundenen Zustände wasserstoffähnliche (nicht relativistische) Wellenfunktionen /117/

$$\psi_{n_A l_A m_A} = R_{n_A l_A}(\alpha_A r) Y_{l_A m_A}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{II.4})$$

und keine Hartree-Fock-Wellenfunktionen verwendet werden, erscheint es günstiger, eine Abschirmung nach Hartree /51/ zu wählen:

$$Z_R^S = Z_2 - \langle r \rangle_H / \langle r \rangle_{HF} \quad (\text{II.5})$$

$\langle r \rangle_H = [3n_A^2 - 1_A(1_A + 1)] a_0 / 2$  ist der mittlere Wasserstoffradius /117/,  $\langle r \rangle_{HF}$  der mittlere Radius für die entsprechende Hartree-Fock-Wellenfunktionen /118/. In Abb. 38 werden die wasserstoffähnliche Wellenfunktion für  $Z_A = 41,0$  und die entsprechende Hartree-Fock-Wellenfunktion für 4d-Elektronen in Wolfram miteinander verglichen.

Tabelle 9: Reduzierte Größen

$$\begin{aligned} \alpha_A &\longrightarrow \alpha_A / \alpha_A = 1 \\ r &\longrightarrow r \alpha_A = r_A & \alpha_A &= Z_A / (n_A a_0) \\ q &\longrightarrow q / \alpha_A = q_A & I_A &= h^2 \alpha_A^2 / 2m \\ b &\longrightarrow b \alpha_A = b_A & &= \frac{13,6 Z_A^2}{n_A^2} [\text{eV}] \\ k &\longrightarrow k / \alpha_A = k_A \\ E_f &\longrightarrow E_f / I_A = \epsilon_A = k_A^2 & & \\ E_A &\longrightarrow E_A / I_A = \theta_A & & \\ dI(b)/dE_f &= I_A^{-1} dI(b_A)/d\epsilon_A & & \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

Die Abschirmung durch die äußeren Elektronen wird durch Verwendung experimenteller Werte /44/ für die Bindungsenergie berücksichtigt. Die Kontinuumszustände werden beschrieben durch

$$\psi_{k_R, l, m} = R_{k_R, l}(-ik_R r_R) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{II.7})$$

sie sind auf  $\epsilon_A$  normiert.

Die differentielle Ionisationswahrscheinlichkeit läßt sich dann schreiben:

$$\frac{dI(b_R)}{d\epsilon_R} = \frac{2j_A + 1}{2l_R + 1} \frac{2Z_A^2 e^4}{\hbar^2} \frac{M_A}{E_A} \frac{1}{4} \sum_{l, m, m_R} |M(b_R; k_R | m; n_R | m_R)|^2 \quad (\text{II.8})$$

$2j_A + 1$  ist die Zahl der Elektronen in der Unterschale A; mit  $2l_A + 1$

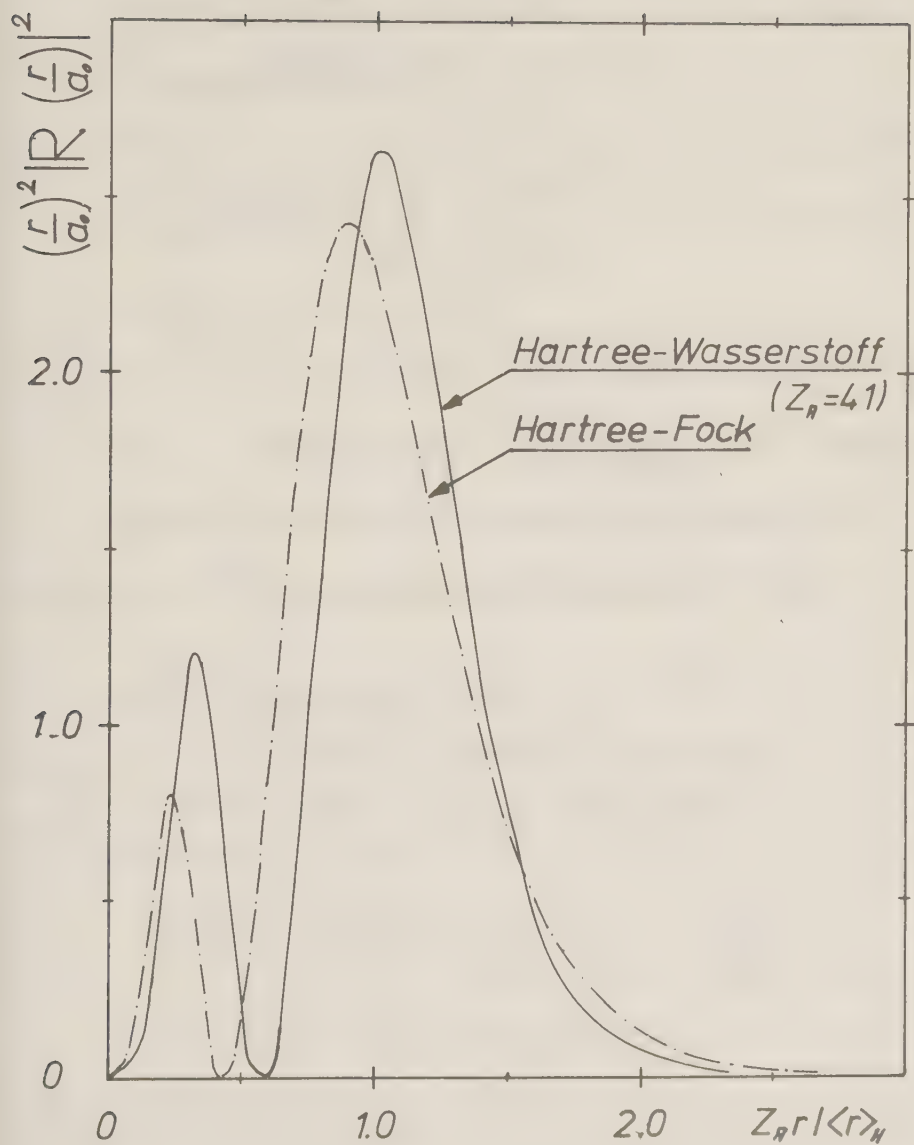


Abb. 38 : Radialanteil der Wellenfunktionen

wird die Summation über  $m_A$  berücksichtigt. Mit Hilfe von (II.3), (II.4) und (II.7) läßt sich  $M$  ausdrücken durch

$$M(b_R; k_R | m_i; n_R | m_R) = 2i \int r_R^2 dr_R \sin \vartheta d\vartheta d\varphi Y_L^m(\vartheta, \varphi) R_{k_R l}^*(i k_R r_R) \times \exp(i q_R r_R \cos \vartheta) K_0(q_R r_R) Y_L^m(\vartheta, \varphi) R_{n_R l}(r_R) \quad (II.9)$$

Für das Produkt  $Y_L^m \cdot Y_{1A}^{m_A}$  gilt die Darstellung (/119/p.1057):

$$Y_L^m(\Omega) Y_{1A}^{m_A}(\Omega) = (-)^{L-m} \sum_{L=|L-L_A|}^{L+L_A} \sum_{M=-L}^L (-)^M [(2L+1)(2L+1) \times (2L_A+1)/4\pi]^{1/2} \begin{pmatrix} L & L & L_A \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & L & L_A \\ -m & M & m_A \end{pmatrix} Y_L^{-M}(\Omega) \quad (II.10)$$

$$\text{wobei } Y_L^{-M}(\Omega) = \left[ \frac{(L-M)!(2L+1)}{(L+M)! 4\pi} \right]^{1/2} P_L^M(\cos \vartheta) e^{-iM\varphi}$$

Im weiteren soll die  $\varphi$ -Integration näher betrachtet werden:

$$\hat{\varphi} := \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{-iM\varphi} K_0[q_R(r_R^2 \sin^2 \vartheta + b_R^2 - 2b_R r_R \cos \vartheta \cos \varphi)]^{1/2} \quad (II.11)$$

Setzt man in Formel (77) von /120/  $\mu = -M$ ,  $\nu = M$ ,  $\Phi = \varphi$ ,  $x = q_A r_A \sin \vartheta$ ,  $y = q_A b_A$  bzw.  $x = q_A b_A$  und  $y = q_A r_A \sin \vartheta$ , so ergibt sich

$$\hat{\varphi} = \begin{cases} 2\pi K_M(q_R r_R \sin \vartheta) I_M(q_R b_R) & \text{für } r_R \sin \vartheta > b_R \\ 2\pi K_M(q_R b_R) I_M(q_R r_R \sin \vartheta) & r_R \sin \vartheta < b_R \end{cases} \quad (II.12)$$

Formel (57) von /120/ liefert heraus mit  $\nu = \mu = M$ ,  $a = r_A \sin \vartheta$ ,  $b = b_A$  und  $\beta = q_A$ :

$$\hat{\varphi} = 2\pi \int_0^\infty \frac{t dt}{t^2 + q_A^2} J_M(b_R t) J_M(r_R t \sin \vartheta) \quad (II.13)$$

Damit läßt sich jetzt (II.9) schreiben:

$$\begin{aligned}
 M(b_R) &= 2i(-)^{L-M} \sum_{L,M} (-)^M [(2L+1)(2L+1)(2L+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} L & L & l_R \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{4\pi} \times \\
 &\times \begin{pmatrix} L & L & l_R \\ -M & M & m_R \end{pmatrix} \left[ \frac{(L-M)!}{(L+M)!} (2L+1) \right]^{1/2} 2\pi \int_0^\infty \frac{t dt}{t^2 + q_R^2} J_M(b_R t) \times \\
 &\times \int_0^\infty dr_R r_R^2 R_{k_R L}^*(ik_R r_R) R_{n_R l_R}(r_R) \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta J_M(r_R t \sin\vartheta) \times \\
 &\times P_L^M(\cos\vartheta) \exp(iq_R r_R \cos\vartheta)
 \end{aligned} \tag{II.14}$$

Für die  $\vartheta$ -Integration hat Watson /121/ (p.379) eine Lösung angegeben:

$$i^{L-M} \sqrt{2\pi} (s r_R)^{-1/2} P_L^M\left(\frac{q_R}{s}\right) J_{L+1/2}(s r_R) = 2i^{L-M} P_L^M\left(\frac{q_R}{s}\right) j_L(s r_R) \tag{II.15}$$

$s^2 = t^2 + q_A^2$  und  $j_L(x)$  ist die sphärische Besselfunktion.

$$\begin{aligned}
 M(b_R) &= 2i(-)^{L-M} \sum_{L,M} (-)^M i^{L-M} [(2L+1)(2L+1)(2L+1)]^{1/2} \times \\
 &\times \begin{pmatrix} L & L & l_R \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & L & l_R \\ -M & M & m_R \end{pmatrix} \int_{k_R L; n_R l_R}^{L M} (q_R, b_R) \\
 \text{wobei} \quad \int_{k_R L; n_R l_R}^{L M} (q_R, b_R) &= \int_{q_R}^\infty s ds A_M^L(q_R, s, b_R) F_{k_R L; n_R l_R}^L(s)
 \end{aligned} \tag{II.16}$$

$$\begin{aligned}
 A_M^L(q_R, s, b_R) &= \frac{1}{s^2} \left[ \frac{(L-M)!}{(L+M)!} (2L+1) \right]^{1/2} P_L^M\left(\frac{q_R}{s}\right) J_M(b_R \sqrt{s^2 - q_R^2}) \\
 F_{k_R L; n_R l_R}^L(s) &= \int_0^\infty dr_R r_R^2 R_{k_R L}^*(-ik_R r_R) R_{n_R l_R}(r_R) j_L(s r_R)
 \end{aligned}$$

Auf die Lösung des Integrals der Funktion F wird weiter unten eingegangen. Zunächst soll die Größe  $D_1(b_A) = \frac{1}{4} \sum_{m, m_A} |M(b_A)|^2$  berechnet

werden. Nach /119/ p.1057 gilt:

$$\sum_{m, m_R} \begin{pmatrix} 1 & 1_R & L \\ -m & m_R & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1_R & L' \\ -m & m_R & M' \end{pmatrix} = \frac{1}{2L+1} \delta_{LL'} \delta_{MM'}$$

und somit für  $D_1(b_A)$

$$\begin{aligned} D_1(b_R) &= \sum_{L, M} (2L+1)(2L_R+1) \begin{pmatrix} 1 & L & 1_R \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \mathcal{T}^{LM} \mathcal{T}^{LM*} \\ &= (2L+1)(2L_R+1) \sum_{L=|L-L_R|}^{L+L_R} \begin{pmatrix} 1 & L & 1_R \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sum_{M=0}^L (2-\delta_{M0}) |\mathcal{T}^{LM}|^2 \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

Zum besseren Verständnis für die Berechnung der Funktion F muß der folgende Einschub gemacht werden:

Die verallgemeinerte hypergeometrische Reihe zweier Variablen  $F_2$  (Appell-Funktion) /120/ läßt sich durch ein Integral mit Whittacker-Funktionen darstellen /65/

$$\int_0^\infty e^{-\beta r} r^B M_{u, \chi}(\alpha r) M_{v, \lambda}(\beta r) dr = \alpha^{\chi+1/2} \beta^{\lambda+1/2} \times \quad (\text{II.18})$$

$$\times [A + (\alpha + \beta)/2]^{-[B + \chi + \lambda + 2]} \Gamma(B + \chi + \lambda + 2) \times$$

$$\times F_2 \left\{ B + \chi + \lambda + 2; \frac{1}{2} + \chi - u, \frac{1}{2} + \lambda - v; 1 + 2\chi, 1 + 2\lambda; \frac{\alpha}{\gamma}; \frac{\beta}{\gamma} \right\}$$

mit  $\gamma = A + (\alpha + \beta)/2$

Die Appell-Funktion von der speziellen Form  $F_2 \{a+1; b, b'; a, a; x; y\}$  läßt sich durch die Summe zweier hypergeometrischer Reihen vom Typ  ${}_2F_1$  ausdrücken /122/. Hieraus folgt, daß in der Integraldarstellung  $\lambda = \chi$  und  $B = 0$  sein muß, um die folgende Umformung verwenden zu können:

$$\begin{aligned} F_2 \{a+1; b, b'; a, a; x; y\} &= a^{-1} (1-x)^{-b} (1-y)^{-b'} \{ [(a-b-b') - \\ &- (b'-b)/(1-x)] {}_2F_1 \{b, b'; a; xy/[(1-x)(1-y)]\} + b' [(1-x)^{-1} + \\ &+ (1-y)^{-1}] {}_2F_1 \{b, b'+1; a; xy/[(1-x)(1-y)]\} \} \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

Im weiteren wird versucht, den Integralausdruck für  $F^L$  (II.16) auf die Form

$$\int_0^\infty dr e^{-\beta r} M_{u, \chi}(\alpha r) M_{v, \chi}(\beta r)$$

zu bringen.

Der Radialanteil der Wellenfunktion des gebundenen Zustandes läßt sich schreiben /117/:

$$R_{n_A l_A}(r_A) = \bar{N}_{n_A l_A} e^{-r_A} \sum_{\nu=1}^{n_A-1} a_{n_A l_A}^{\nu} r_A^{\nu} \quad (\text{II.20})$$

Die Werte für die Normierungskonstante  $\bar{N}_{n_A l_A}$  und die Koeffizienten  $a_{n_A l_A}^{\nu}$  können für die K-, L- und M-Schale aus /48a/ entnommen werden, für die N-Schale sind sie in Tabelle 10 aufgeführt.

Tabelle 10

| Schale | $\bar{N}_{n_A l_A}$ | $\sum_{\nu=1}^{n_A-1} a_{n_A l_A}^{\nu} r_A^{\nu}$ |
|--------|---------------------|----------------------------------------------------|
| 4s     | 2                   | $1 - 3r_A + 2r_A^2 - \frac{1}{3} r_A^3$            |
| 4p     | $2 \sqrt{5/3}$      | $r_A - r_A^2 + \frac{1}{5} r_A^3$                  |
| 4d     | $2/\sqrt{5}$        | $r_A^2 - \frac{1}{3} r_A^3$                        |
| 4f     | $2/(3 \sqrt{35})$   | $r_A^3$                                            |

Die radiale Coulombwellenfunktion wird ebenso wie die sphärische Besselfunktion durch Whittackerfunktionen ausgedrückt /48, 65, 123/:

$$R_{k_A l}(-ik_A r_A) = \bar{N}(k_A, l) (2ik_A r_A)^{-l} M_{-in_A/k_A, l+1/2}(2ik_A r_A)$$

$$j_L(sr_A) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(L+3/2)} \left(\frac{1}{4i}\right)^{L+1} \frac{1}{sr_A} M_{0, L+1/2}(2isr_A) \quad (\text{II.21})$$

$$|\bar{N}(k_A, l)|^2 = \frac{2n_A}{[(2l+1)!!]^2} \left\{ \prod_{j=1}^L \left( j^2 + \frac{n_A^2}{k_A^2} \right) \right\} [1 - \exp(-2\pi n_A/k_A)]^{-1}$$

Die Whittackerfunktionen haben noch nicht die geforderte Form.

$j_L(sr_A)$  wird daher nach  $M_{\nu, l+1/2}(\text{Br})$  entwickelt.

$$j_L(sr_R) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(l+3/2)} \left(\frac{1}{4i}\right)^{l+1} \frac{1}{sr_R} \sum_{B=-(n_R-1)}^{n_R-1} C_{\Delta l, \nu}^B(l, s) M_{B, l+1/2}(2isr_R)$$

$$\text{wobei } C_{\Delta l, \nu}^B(l, s) = \frac{\Gamma(l+3/2)}{\Gamma(l+\Delta l+3/2)} \left(\frac{1}{4i}\right)^{\Delta l} s^{-\nu} \tilde{C}_{\Delta l, \nu}^B(l)$$
(II.22)

mit  $\Delta l = L-1$ . Die Entwicklungskoeffizienten  $\tilde{C}_{\Delta l, \nu}^B$  erhält man aus der Relation

$$(sr_R)^\nu M_{0, L+1/2}(2isr_R) = \sum_B \tilde{C}_{\Delta l, \nu}^B M_{B, l+1/2}(2isr_R)$$
(II.23)

durch Koeffizientenvergleich /65/. Die Koeffizienten  $C_{\Delta l, \nu}^B$  für die K-, L- und M-Schale können /48a/ entnommen werden; der Phasenfaktor  $i^{\Delta l}$  ist ohne Bedeutung. Für die N-Schale ist

$$\hat{C}_{\Delta l, \nu}^B(l) = (2s/i)^\nu C_{\Delta l, \nu}^B(l, s)$$
(II.24)

in Tabelle 11 aufgeführt. Setzt man nun (II.20) bis (II.24) in (II.18) ein, so folgt:

$$F_{k_R l; n_R l_R}^L(s) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(2l+3)}{\Gamma(l+3/2)} \bar{N}(k_R, l) \bar{N}_{n_R l_R} \frac{k_R^l s^l}{[1+i(s-k_R)]^{l+3}} \times$$

$$\times \sum_B \left\{ \sum_\nu a_{n_R l_R}^\nu \left(\frac{i}{2s}\right)^\nu \hat{C}_{\Delta l, \nu}^B(l) \right\} F_2\{l+1-B\}$$
(II.25)

mit  $F_2\{l+1-B\} \equiv F_2\{2l+3; l+1-B, l+1+in_R/k_R; 2l+2, 2l+2;$

$$\frac{2is}{1+i(s-k_R)}; \frac{-2ik_R}{1+i(s-k_R)}\}$$

Diese Appell-Funktion kann nun weiter nach (II.19) behandelt werden. Für die numerischen Rechnungen erwies es sich ferner als vorteilhaft die Legendre-Polynome ebenfalls durch hypergeometrische Reihen  ${}_2F_1$  auszudrücken. Der endgültige Ausdruck für die differentielle Ionisierungswahrscheinlichkeit lautet somit:

$$\frac{dI(b_R, n_R, l_R, j_R)}{d\varepsilon_R} = \frac{2j_R + 1}{2l_R + 1} \frac{2Z_1^2 \Theta^4}{\hbar^3} \frac{M_1}{E_1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(2l_R+1) \sum_{L=0}^{l+l_R} \begin{pmatrix} l & l & l_R \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sum_{M=0}^L (2-\delta_{M0}) \left\{ \frac{2L+1}{4M(M!)^2} \frac{(L+M)!}{(L-M)!} x \right.$$

$$\left. \times \left[ \frac{\Gamma(2l+3)}{\Gamma(l+3/2)} \right]^2 \frac{\pi}{2} \frac{n_R}{[(2l+1)!]^2} \prod_{j=1}^L [l_j^2 + (n_R/k_R)^2] \cdot [1 - \exp(-2\pi n_R/k_R)]^{-1} N_{n_R, l_R}^2 k_R^{2L} \right\} \times$$

$$\times \left| \int_{q_R}^{\infty} \frac{ds}{s} [1 - (q_R/s)^2]^{M/2} {}_2F_1(M-L, M+L-1; M+1; \frac{1-q_R/s}{2}) J_M(b_R \sqrt{s^2 - q_R^2}) \sum_{B=- (n_R-1)}^{n_R-1} \right|$$

$$\left[ \sum_{\nu=l_R}^{n_R-1} a_{n_R, l_R}^{\nu} \left( \frac{i}{2s} \right)^{\nu} \hat{C}_{\Delta l, \nu}^B(l) \right] \frac{s^L}{[1+i(s-k_R)]^{2l+3}} \frac{1}{l+1} \left[ \frac{1+i(s-k_R)}{1-i(s+k_R)} \right]^{l+1-B} \left[ \frac{1+i(s-k_R)}{1+i(s+k_R)} \right]^{l+1-i n_R/k_R} \times$$

$$\times \frac{1}{1-i(s+k_R)} \left\{ [n_R + i \frac{n_R - B s}{k_R}] {}_2F_1(l+1-B, l+1-i n_R/k_R; 2l+2; \frac{4s k_R}{1+(s+k_R)^2}) + \right.$$

$$\left. (l+1-i n_R/k_R) \frac{1+i(s-k_R)}{1+i(s+k_R)} {}_2F_1(l+1-B, l+2-i n_R/k_R; 2l+2; \frac{4s k_R}{1+(s+k_R)^2}) \right\} \quad (II.26)$$

Tabelle 11  $j^{\Delta l} \hat{C}_{\Delta l, \nu}^{\mathbf{B}}(l)$  für  $\nu = 3$

| $\Delta l$ \ B | -3                   | -2                    | -1                     | 0                      | +1                     | +2                    | +3                   |
|----------------|----------------------|-----------------------|------------------------|------------------------|------------------------|-----------------------|----------------------|
| 0              | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $6(l+1)/(l+2)$        | $3(l-1)/(l+1)/(l+2)$   | 0                      | $-3(l-1)/(l+1)/(l+2)$  | $-6(l+1)/(l+2)$       | $(l+1)/(l+2)/(l+3)$  |
| +1             | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $2(l+1)/(l+2)/(l+4)$  | $(l-5)/(l+1)/(l+2)$    | $-4(l+1)/(l+2)$        | $(l-5)/(l+1)/(l+2)$    | $2(l+1)/(l+2)/(l+4)$  | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ |
| -1             | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $-2(l-3)/(l+1)/(l+2)$ | $(l-1)/(l+1)/(l+6)$    | $4(l-1)/(l+1)$         | $(l-1)/(l+1)/(l+6)$    | $-2(l-3)/(l+1)/(l+2)$ | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ |
| +2             | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $4(l+1)/(l+2)/(l+3)$  | $-5(l+1)/(l+2)/(l+3)$  | 0                      | $5(l+1)/(l+2)/(l+3)$   | $-4(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $(l+1)/(l+2)/(l+3)$  |
| -2             | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $-4(l-2)/(l+1)/(l+2)$ | $-5(l-2)/(l-1)/(l+1)$  | 0                      | $5(l-2)/(l-1)/(l+1)$   | $4(l-2)/(l+1)/(l+2)$  | $(l+1)/(l+2)/(l+3)$  |
| +3             | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $6(l+1)/(l+2)/(l+3)$  | $-15(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $20(l+1)/(l+2)/(l+3)$  | $-5(l+1)/(l+2)/(l+3)$  | $6(l+1)/(l+2)/(l+3)$  | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ |
| -3             | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ | $-6(l-2)/(l+1)/(l+2)$ | $-15(l-2)/(l-1)/(l+1)$ | $-20(l-2)/(l-1)/(l+1)$ | $-15(l-2)/(l-1)/(l+1)$ | $-6(l-2)/(l+1)/(l+2)$ | $-(l+1)/(l+2)/(l+3)$ |

Herrn Prof. Dr. R. Sizmann danke ich dafür, die vorliegende Arbeit an seinem Institut ermöglicht zu haben, sowie für die Unterstützung bei ihrer Durchführung.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. F. Bell, der mir die Anregung zu dieser Arbeit gab, für viele klärende Gespräche über auftretende Probleme.

Herrn Dr. H.-D. Carstanjen danke ich für die vielen Diskussionen. Allen Mitgliedern des Institutes und der Werkstatt sei für die gute Zusammenarbeit gedankt.

An dieser Stelle möchte ich mich auch bei der Arbeitsgruppe Beschleuniger der physikalisch-technischen Abteilung der Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung mbH München für die Hilfe bei den Experimenten an den dortigen Beschleunigern bedanken.

Die umfangreichen Computerrechnungen wurden am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften durchgeführt.

Die Arbeit erhielt finanzielle Unterstützung vom Bundesministerium für Forschung und Technologie.

## Lebenslauf

4. Dez. 1941 geboren in Lichtenfels/Bay.
- 1946 Volksschule Katzwang/Ldkrs.Schwabach
- 1950 Volksschule Reichelsdorf/Nürnberg
- 1952 Realgymnasium Nürnberg
- 1960 Altes Realgymnasium München
- 1961 Abitur  
Beginn des Studiums der Physik an der  
Ludwig-Maximilians-Universität München
- 1966 Diplomarbeit bei Prof. Dr. R. Sizmann
- 1967 Aufnahme in die Studienstiftung des  
Deutschen Volkes
- 1968 Ablegung der Diplomprüfung  
In der Folge Durchführung einer Doktorarbeit  
und Tätigkeit als wissenschaftlicher Ange-  
stellter am Lehrstuhl Prof. Dr. R. Sizmann  
der Sektion Physik der Universität München.







